

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Mention Électronique
Spécialité Micro-Optoélectronique

présenté par

BELKACEM RABAH Hamid

&

CHERBALI Mohammed Amine

pour l'obtention du diplôme de Master en Électronique option Micro-
optoélectronique

Etude et simulation d'une structure à base de $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y/In_zGa_{1-z}Sb$

Proposé par : Pr AISSAT Abdelkader

Année Universitaire 2015-2016

Remerciements

Nous exprimons humblement toute notre gratitude envers notre Dieu tout puissant et nous le remercions infiniment pour nous avoir donné la force et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire.

Pour ses conseils, son soutien moral et pour nous avoir dirigés et orientés du début à la fin de ce travail, nous témoignons une profonde reconnaissance et adressons, du plus profond de notre cœur, un grand remerciement à notre promoteur Monsieur A. AISSAT Professeur à l'université de BLIDA qui a proposé le thème de ce mémoire.

Nos vifs remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils ont porté à notre recherche en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions.

Nous remercions aussi nos professeurs qui nous ont soutenus durant notre formation à l'université de BLIDA.

Nous remercions nos parents qui ont été là pour nous motiver et nous diriger pendant tout notre parcours scolaire.

Dédicace

À mes très chers parents

*Pour tous leurs sacrifices qu'ils ont consentis pour me
permettre de suivre mes études dans les meilleures
conditions possibles. J'espère qu'ils trouvent dans ce
travail toute ma reconnaissance et tout mon amour.*

*À mes frères, mes sœurs Karima, Nesrine et leurs maris
ainsi leurs enfants, je leurs souhaite une belle vie pleine
de joie et d'amour.*

*À mes chères amies Hamid, Medjdi, Athmane, Nawel et
Rym pour leurs soutiens dans les moments difficiles et à
tous mes autres amis sans exception.*

Cherbalí M^{ed} Amíne

Dédicace

*À ma chère mère, et à mon cher père qui me manque
tellement,*

*Qui n'ont jamais cessé, de formuler des prières à mon
égard, de me soutenir et de m'épauler pour que je puisse
atteindre mes objectifs.*

*A mes frères, sœurs et à tous mes neveux surtout
Hanaa. Pour leur soutien moral et leurs conseils
précieux tout au long de mes études.*

*A mes chères amis Amine, Manel, Oussama, Mohamed
et Tina pour leurs aides et supports dans les moments
difficiles.*

A tous mes autres amis(e)s.

A tous ceux que j'aime et ceux qui m'aiment.

BELKACEM-RABAH Hamid

ملخص:

هذا العمل يحتوي على دراسة لبنية متكونة من بئر كمومي مضغوط متكون من منطقة نشطة على الركيزة InGaSbBi/InGaSb, من أجل الحصول على طول الموجة 1550 نانو متر. هذا الخليط الرباعي الذي هو من أشباه النواقل III-V, يمثل خصائص جد مهمة. هذا بفعل إدخال الإنديوم و البزموت على الركيزة InGaSb, لقد قمنا بدراسة تأثير كل من الانديوم والبزموت على تقلص البنية الطاقوية, الفجوة, الطاقة التي تمر بمرحلة انتقالية, والطاقة من تكميم, وحساب طول الموجة بدلالة عرض البئر في لمنطقة النشطة و نسبة الإنديوم و البزموت.

كلمات المفاتيح: اشباه النواقل, البزموت, الانديوم, المنطقة النشطة, بئر كمومي, طول الموجة.

Résumé :

Ce travail porte sur l'étude d'une structure laser à base d'un puits quantique et composé d'une zone active sur le substrat InGaSbBi/InGaSb, en vue de l'obtention de la longueur d'onde 1550 nm. Cet alliage quaternaire qui est un semi-conducteur III-V présente des caractéristiques importantes. D'une manière drastique due à l'incorporation d'Indium et de Bismuth dans le substrat InGaSb. Nous avons étudié l'effet de d'indium et de bismuth sur la contrainte, la structure de bande, l'énergie de transition, l'énergie de quantification et nous avons calculé la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits à la zone actif ainsi que la concentration d'indium et de bismuth.

Mots clés : Semi-conducteur, Bismuth, Indium, Zone active, Puits quantique, Longueur d'onde.

Abstract :

This work focuses on the study of a base of a quantum well laser structure comprises an active region on the InGaSbBi / InGaSb substrate in order to obtain the wavelength of 1550 nm. This alloy which is a quaternary III-V semiconductor has important characteristics. a drastically due to the incorporation of indium and bismuth in the InGaSb substrate. We studied the effect of indium and bismuth on coercion, the band structure, transition energy, energy quantization and calculate the wavelength depending on the width of the well to the active area and the concentration of indium and bismuth.

Keywords: Semiconductor, Bismuth, Indium, Active zone, Quantum well, wavelength.

Listes des acronymes et abréviations

- E** : Energie de photon.
- h** : Constante de Planck.
- C** : Vitesse de la lumière dans le vide.
- λ** : Longueur d'onde.
- m_e** : Mass effective.
- Ga** : Gallium.
- In** : Indium.
- Sb** : Antimoine.
- Bi** : Bismuth.
- BC** : Bande de conduction.
- BV** : Bande de valence.
- q** : Charge élémentaire.
- K** : Constante de Boltzmann.
- n** : Coefficient d'idéalité.
- L** : Longueur de puits.
- Lc** : Épaisseur critique
- E_g** : Energie de gap.
- ε** : Déformation hydrostatique.
- a_s** : Paramètre de maille du substrat.
- a_e** : Paramètre de maille de la couche active.
- γ** : Coefficient de poisson.
- Δ_a** : Désaccord paramétrique.
- C_{ij}** : Tenseur d'élasticité.
- h_c** : Épaisseur critique.
- C_{Bi}** : Paramètre de couplage.
- E_{Bi}** : L'énergie de localisation du bismuth.
- E_{HH}** : Energie de la bande de trous lourds.
- E_{LH}** : Energie de la bande de trous légers.

α_v : Potentiel de déformation dans la bande de valence.

α_c : Potentiel de déformation dans la bande de conduction.

b : Potentiel de déformation tétragonale.

$E_{v,moy}$: Centre de gravité de la bande de valence.

ΔE_{sh} : Décalage énergétique induit par la contrainte de cisaillement.

ΔE_{lh} : Décalage d'énergie de la bande de trou lourd.

ΔE_{hh} : Décalage d'énergie de la bande de trou léger.

E_{gcont} : Energie de gap contraint.

E_{gncont} : Energie de gap non contraint.

E_{tr} : Energie de transition.

Table des matières

Introduction générale	01
Chapitre 1 Etat de l'art	
I.1 Introduction	03
I.2 Généralité sur les semi-conducteurs	03
I.3 Les semi-conducteurs III-V	04
I.3.1 définition	04
I.3.2 Système cristallin réseau cristallin	05
<i>a Cristal cubique</i>	<i>05</i>
<i>b La structure Zinc Blende</i>	<i>06</i>
<i>c La structure diamant</i>	<i>06</i>
I.4 Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur	07
I.4.1 La bande d'énergie d'un semi-conducteur	07
I.4.2 Le gap direct et indirect	08
<i>a Semi-conducteur à gap direct</i>	<i>08</i>
<i>b Semi-conducteur à gap indirect</i>	<i>08</i>
I.5 Hétérostructure	09
I.5.1 Notion d'épitaxie	09
I.5.3 Les puits quantiques.....	09
I.5.4 Les types de puits quantiques existent.....	10
<i>a Puits quantiques de type-I.....</i>	<i>10</i>
<i>b Puits quantiques de type-II</i>	<i>10</i>
I.6 Les propriétés de l'absorption	11
I.7 Choix de l'épitaxie $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y$	12
I.8 L'étude des paramètres électroniques	13
I.8.1 Le paramètre de maille	14
I.9 La contrainte	14
I.10 Epaisseur critique	16
I.11 Effet de Bismuth sur la bande de valence	18

I.12	Effet de la contrainte	18
I.12.1	Effet de la contrainte sur le gap	18
I.13	Les états énergétiques dans un puits quantique	21
I.13.1	Puits de profondeur infinie.....	22
I.13.2	Puits quantique de profondeur finie.....	24
I.14	Energie de transition	26
I.15	Conclusion	27

Chapitre 2 Résultat et discussion

II.1	Introduction	28
II.2	L'étude de paramètre de maille	28
II.2.1	Le paramètre de maille sur le substrat	28
II.2.2	Delta E_g	29
II.2.1	Le paramètre de maille sur l'épitaxie	30
II.3	Calcule de la contrainte	30
II.4	Calcule de l'épaisseur critique	32
II.5	Effet de l'éclatement sur la bande de valence	32
II.6	Effet de la contrainte	34
II.6.1	Effet de la contrainte sur le gap	34
II.6.2	Effet de la contrainte sur la bande de valence	34
II.6.3	Effet de la contraint sur la barrie de conduction et de valence	36
II.7	Détermination de taux de confinement	37
II.8	Calcul de l'énergie de quantification	38
II.9	Energie de transition	41
II.10	Calcul de La longueur d'onde	48
	Conclusion générale	57
	Annexes	59
	Bibliographie	61

Liste des figures

Figure 1.1 : Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V.....	05
Figure 1.2 : a. cubique simple. b. cubique centré. c. cubique face centrée.....	06
Figure 1.3 : Plans cristallographiques.....	06
Figure 1.4 : mailles cristallographiques des structures diamant et zinc blende.....	07
Figure 1.5 : Un schéma simplifié de la structure de bande d'énergie.....	07
Figure 1.6 : Structure de bande schématique d'un s-c à gap direct (a) et à gap indirect (b).	08
Figure 1.7 : Schéma d'une structure de puits quantique.....	09
Figure 1.8 : Profil de puits quantique de type-I	10
Figure 1.9 : Profil de puits quantique de type-II	10
Figure 1.10 : Représentation de trois niveaux possibles des électrons d'un groupe d'atomes.	11
Figure 1.11 : Emission stimulé	12
Figure 1.12 : les deux types de déformation tension et compression	15
Figure 1.13 : Illustration d'une couche contrainte a) en compression b) relaxée	16
Figure 1.14 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe a) non contraint b) en compression c) en tension	19
Figure 1.15 : puits de potentiel rectangulaire infiniment profond	22
Figure 1.16 : Energie de transition dans un puits quantique	27
Figure 2.1 : Variation du paramètre de maille (A°) du substrat $In_xGa_{1-x}Sb$ en fonction de la concentration d'indium.	28
Figure 2.2 : L'évolution de ΔE_g en fonction de la concentration d'indium et du bismuth.....	29
Figure 2.3 : Variation du paramètre de maille du $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y$ en fonction de la concentration d'Indium et de Bismuth	30
Figure 2.4 : Désaccord de maille en fonction de la variation de l'indium et bismuth ...	31
Figure 2.5 : Désaccord de maille en fonction de la variation de l'indium et (model ISO).....	31

Figure 2.6 : Variation de l'épaisseur critique en fonction d'indium et du bismuth	32
Figure 2.7 : Eclatement de la bande de valence en fonction de l'indium et bismuth ...	33
Figure 2.8 : Eclatement de la bande de valence en fonction de l'indium et bismuth ...	33
Figure 2.9 : Effet de la contrainte sur la bande de conduction en fonction de la concentration de l'indium et bismuth	34
Figure 2.10 : Effet de la contrainte sur la bande de valence en fonction de la concentration de l'indium et bismuth.	35
Figure 2.11 : Effet de la contrainte sur l'énergie de la bande interdit en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth.	35
Figure 2.12 : la barrière E_c en fonction de la concentration d'indium et du bismuth ...	36
Figure 2.13 : la barrière E_v en fonction de la concentration d'indium et du bismuth ..	36
Figure 2.14 (a, b) : Taux de confinement en fonction de l'indium et bismuth	37
Figure 2.15 : Evolution de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur du puits	38
Figure 2.16 : quantification des niveaux de trous lourd dans le puits en fonction de largeur du puits	39
Figure 2.17 : l'évolution de l'énergie de quantification en fonction d'une concentrations fixe de l'indium et la largeur du puits pour les 3 niveaux	40
Figure 2.18 (a, b, c et d) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents variations de bismuth et $\text{In}(x)=10\%$	41
Figure 2.19 (a, b, c et d) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents variations de bismuth et $\text{In}(x)=20\%$	42
Figure 2.20 (a, b, c et d) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents variations de bismuth et $\text{In}(x)=30\%$	43
Figure 2.21 (a, b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents concentration l'indium et $\text{Bi}(y)=2\%$	44
Figure 2.22 (a, b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents concentration l'indium et $\text{Bi}(y)=4\%$	45
Figure 2.23 (a, b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents concentration l'indium et $\text{Bi}(y)=6\%$	46

Figure 2.24 (a b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents valeurs l'indium et Bi(y)=10%	47
Figure 2.25 (a, b, c et d) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents valeurs de bismuth et In(x)=10%	48
Figure 2.26 (a, b, c et d) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents variations de l'indium et bismuth x=20%	49
Figure 2.27 (a, b, c et d) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents variations de l'indium et bismuth x=30%	50
Figure 2.28 (a, b et c) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents variations de l'indium et bismuth y=2%	51
Figure 2.29 (a, b et c) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents variations de l'indium et bismuth y=4%	52
Figure 2.30 (a, b et c) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents variations de l'indium et du bismuth y=6%	53
Figure 2.31 (a, b et c) : évolution de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents variations de l'indium et du bismuth y=10%	54
Figure 2.32 (a, b c et d) : croissance de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différents concentrations de l'indium et du bismuth dans le 1 niveau.....	55
Figure 2.33 (a, b, c et d) : Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits et la concentration d'indium et du bismuth dans le niveau n=2	56

Liste des tableaux

Tableau 1.1 : Exemples de semi-conducteurs	03
Tableau 1.2 : Un extrait du tableau périodique qui présente le Placement des différents matériaux semi-conducteurs	03
Tableau 1.3 : Les coefficients élastiques selon le type de la structure	18

Introduction générale

L'être humain est toujours à la recherche de nouvelles ressources. Depuis la découverte du Laser et son vaste champ d'application, d'énormes progrès ont été effectués et beaucoup d'avancées ont été réalisées, que ce soit dans le domaine médical ou dans les domaines des télécommunications et de l'électronique.

Depuis son invention dans les années 1950, le laser ne cesse de se voir attribuer de nouvelles fonctions et au courant des dernières années, le laser a fait une remarquable entrée dans tous les domaines. Prenez pour exemple : Le lecteur pour cd, les rayons lasers à IMAX, le pointeur, l'imprimante, l'industrie de transformation (soudure, coupe) les hologrammes, la mire d'une arme à feu, l'application médicale, dentaire, ophtalmologique et plus encore [1].

Aujourd'hui Les lasers ont leur utilisation partout. Et Les scientifiques continuent toujours à rechercher de nouveaux matériaux afin d'améliorer la rapidité, la fiabilité et le temps de réponse, ainsi que la résistance aux différentes interférences et conditions naturelles (température, humidité...).

Le laser peut être aussi un générateur d'ondes électromagnétiques (infrarouge rayon X) fonctionnant sur le principe de l'émission stimulée d'un rayonnement cohérent monochromatique (qui est d'une seule couleur) et qui ne contient qu'une fréquence ou une longueur d'onde bien déterminée qui permet d'obtenir une grande puissance énergétique très directive en un faisceau très fin.

L'étude présentée dans ce mémoire est répartie en deux chapitres qui unifient, les différents paramètres électroniques et optiques des lasers à base de $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y / In_zGa_{1-z}$, et les équations mathématiques permettant de faire des analyses numériques.

- Le premier chapitre est consacré aux notions fondamentales des matériaux Semi-conducteurs III-V et des généralités sur les lasers ainsi que l'étude du matériau $GaInSbBi$ et ses caractéristiques structurales, électroniques, optiques.
- Le deuxième chapitre présente l'illustration de la simulation et les résultats des différents paramètres et caractéristiques d'une structure d'émission laser à base de $GaInSbBi$.

Objectif : ce travail consiste à faire une étude sur une structure $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y / In_zGa_{1-z}Sb$ pour avoir un laser émettant une longueur d'onde $1.55 \mu m$.

Chapitre 1 Généralités

1.1 Introduction

On va approcher dans ce chapitre les différentes caractérisations des semi-conducteurs et précisément les semi-conducteurs de type III-V qui ont des propriétés plus intéressantes comme le point de fusion, une résistance plus faible et une bande d'énergie plus grande. Les applications de ces matériaux ont connu une évolution extraordinaire dans les différents domaines électroniques et plus spécialement dans l'optoélectronique (laser, photovoltaïque, ...). La révolution dans ce domaine est de pouvoir mixer des alliages à l'échelle nanostructure (puits quantique, boîte quantique,...).

1.2 Généralité sur les semi-conducteurs

Les matériaux semi-conducteurs sont en général des corps dont la résistivité est intermédiaire entre celle des conducteurs et celle des isolants, disons de 10^{-3} à 10^4 Ω .cm (ou plus) [2]. Dans les semi-conducteurs, le gap est assez faible, ce qui permet à des porteurs de passer dans la bande de conduction simplement grâce à leur énergie d'agitation thermique, ainsi le semi-conducteur en tant que mauvais conducteur ou mauvais isolant a ,lui, une conductivité qui augmente avec la température [3].

Un des matériaux semi-conducteurs le plus couramment utilisé est le Silicium, qui appartient au groupe IV; il contribue grâce à son faible coût, à sa grande disponibilité et à sa bonne conductivité thermique, à la réalisation des circuits intégrés et à la technologie la plus mature. D'ailleurs, la majorité des cellules solaires sont à base de silicium ; cependant, ses propriétés sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique) [4].

Le tableau 1.1 donne des exemples de matériaux ou de composés semi-conducteurs en fonction des éléments qui les constituent et de la position de ces éléments dans le tableau de Mendeleïev.

Colonne	semi-conducteur
IV	Ge, Si
III-V	GaAs, GaP, GaSb, InP, InSb
	AlGaAs, GaAsP
	AlGaAsP
II-VI	CdS, HgTe, CdTe, ZnTe,
	CdHgTe

Tableau 1.1 : Exemples de semi-conducteurs [2].

1.3 Les semi-conducteurs III-V

1.3.1 Définition

Les semi-conducteurs III-V, sont formés à partir d'un élément de la colonne III et d'un autre élément de la colonne V de la classification périodique ; Ils ont des propriétés électroniques très intéressantes en électronique rapide et en optoélectronique.

Le tableau 1.2 représente une partie de la table de Mendeleïev, dite tableau périodique des éléments, contenant des matériaux semi-conducteurs.

III	VI	V
$10.811 {}^5B$	$12.011 {}^6C$	$14.007 {}^7N$
$26.982 {}^{13}Al$	$28.086 {}^{14}Si$	$30.974 {}^{15}P$
$69.723 {}^{31}Ga$	$72.64 {}^{32}Ge$	$74.922 {}^{33}As$
$114.82 {}^{49}In$	$118.71 {}^{50}Sn$	$121.76 {}^{51}Sb$

Tableau 1.2 : Un extrait du tableau périodique qui présente le Placement des différents matériaux semi-conducteurs [5].

Le diagramme de la Figure 1.1 représente les variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin « a » qui varie lui-même avec la composition. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap « E_g » et du paramètre

cristallin « a », en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect. Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire comme le GaAs ou l'InP. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [6].

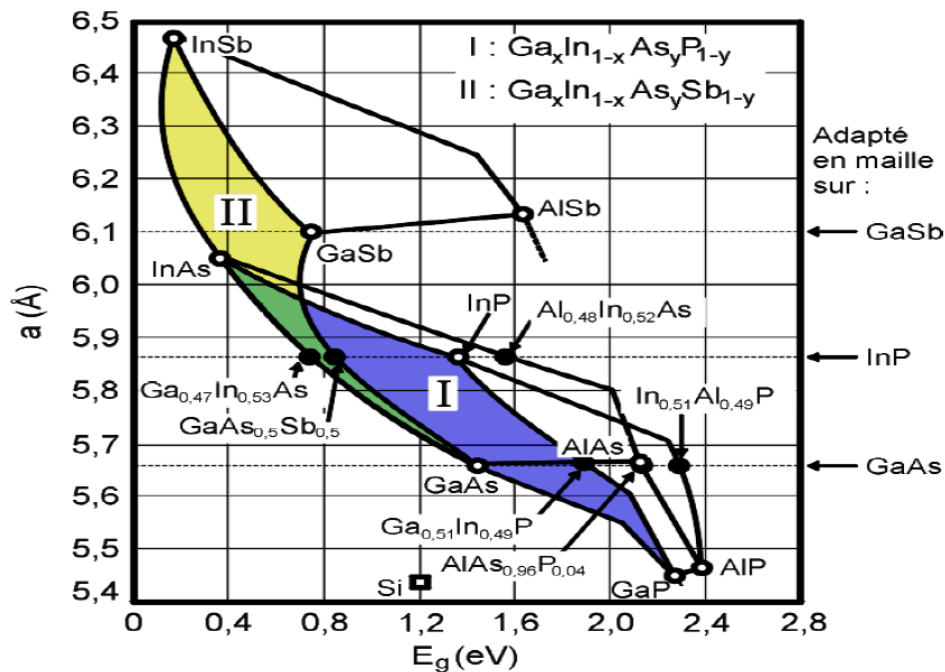


Figure 1.1 : Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V [6].

1.3.2 Système cristallin réseau cristallin

Un cristal peut être représenté à partir d'une cellule de base qui est répétée périodiquement formant ainsi le réseau cristallin. Selon la nature des opérations du système de symétrie qui laissent la structure cristalline invariante, on est amené à définir sept systèmes cristallins, parmi lesquels le système cubique [7].

a Cristal cubique

La plupart des semi-conducteurs cristallisent selon un système cubique. Le système cubique comprend trois réseaux différents possibles, selon la disposition des atomes comme l'indique la figure 1.2 :

- Cubique simple : les atomes sont aux sommets du cube (figure (1.2.a)).

- Cubique centré : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube (figure (1.2.b)).
- Cubique face centrée : identique au cubique simple mais avec un atome au centre de chaque face (figure (1.2.c)).

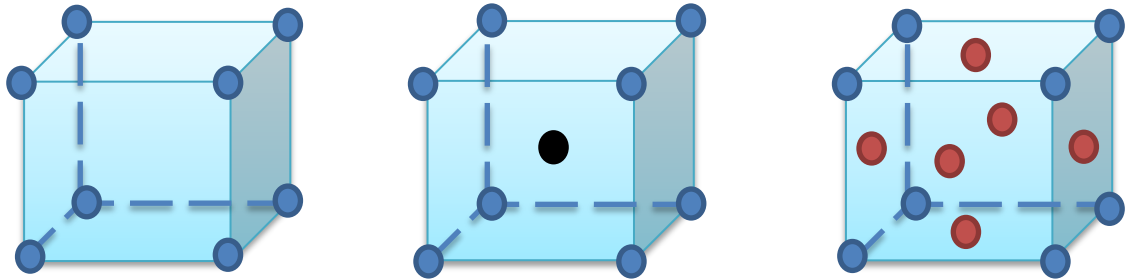


Figure 1.2 : a. cubique simple. b. cubique centré. c. cubique face centrée [2].

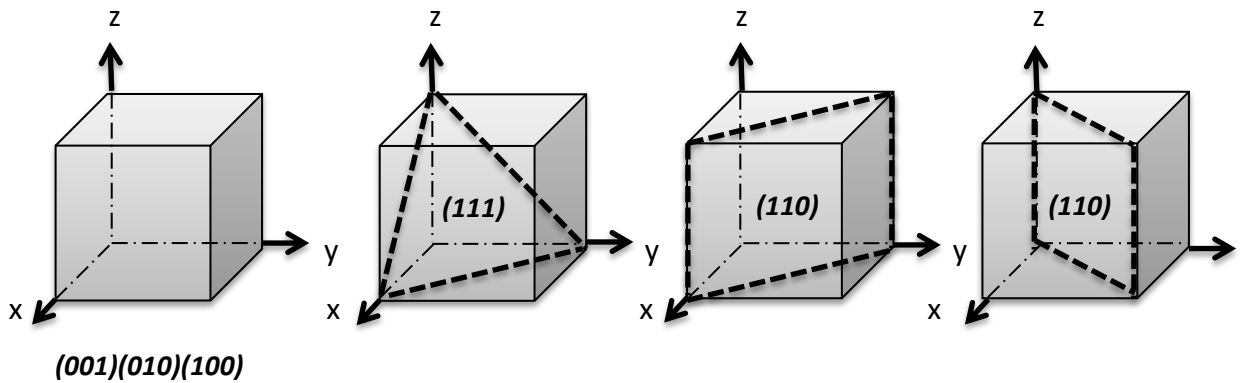


Figure 1.3 : Plans cristallographiques [2].

La figure 1.3 représente certains cristallographiques repérés par leur « indice de Miller ». La direction perpendiculaire au plan (h, k, l) se note $[h, k, l]$.

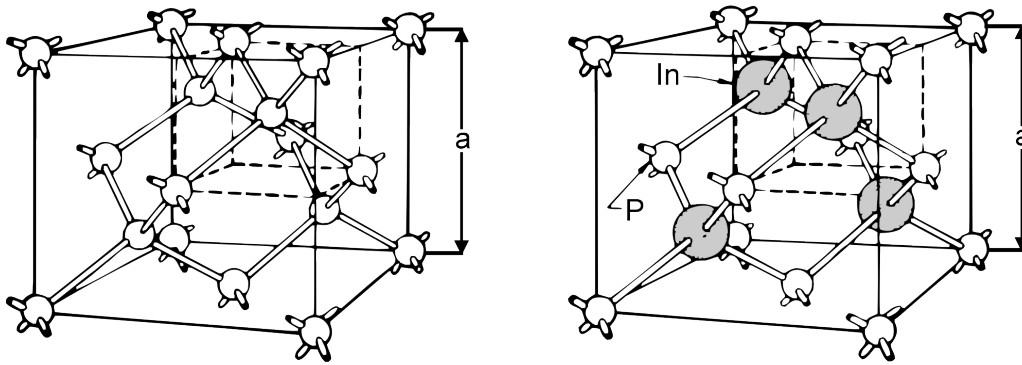
b La structure Zinc Blende :

La plupart des matériaux III-V cristallisent dans la structure sphalérite dite « Zinc Blende » représentée sur la Figure 1.4. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, (C, Ge, Si, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubique face centrée (CFC), un sous-réseau constitué d'éléments III et l'autre, d'éléments V, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, d'une quantité $(a/4, a/4, a/4)$, « a » étant le paramètre cristallin, c'est à dire la longueur de l'arête du cube élémentaire [7].

c La structure diamant :

On parle de cristal type « diamant » lorsque tous les atomes qui composent la maille sont identiques. Les semi-conducteurs comme le silicium ou le germanium ont une structure de type « diamant ». C'est aussi le cas pour le zinc type- α , de l'étain gris (forme α , qui n'est plus

métallique mais semi-conductrice), et bien entendu pour le carbone diamant la (Figure 1.4.)



Diamant
(C, Ge, Si, etc.)

Zinc Blende
(GaAs, InP, etc.)

Figure 1.4 : mailles cristallographiques des structures diamant et zinc blende [8].

1.4 Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur

1.4.1 La bande d'énergie d'un semi-conducteur

Lors de la formation du solide, le rapprochement des atomes modifie le nombre des niveaux d'énergie disponibles pour les électrons autour du noyau. L'influence des atomes les uns sur les autres tend à modifier les niveaux d'énergie. Les électrons voient leurs niveaux d'énergie non plus distribués sur des états discrets mais plutôt sur des « bandes » discrètes d'énergie, séparées par des bandes interdites, comme le montre la Figure 1.5.

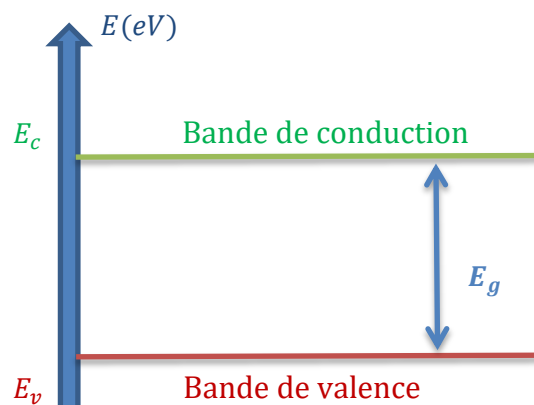


Figure 1.5 : Un schéma simplifié de la structure de bande d'énergie.

La première bande présentant un réel intérêt est la bande de valence qui correspond aux électrons de valence. Cette bande est généralement saturée mais ses électrons peuvent en sortir plus ou moins facilement suivant la nature du solide. Enfin, après la bande de valence, on rencontre la bande de conduction ; elle est, suivant les

cas, vide ou incomplète. La séparation d'énergie « E_g » entre la bande de conduction et la bande de valence, appelée largeur de la bande interdite, détermine le comportement électrique du corps.

Un isolant est un corps dont la bande de valence est saturée alors que la bande de conduction est entièrement vide, ces deux bandes étant séparées par une bande interdite ou « gap » de valeur E_g supérieure à 6 eV.

Les matériaux ayant une largeur de la bande interdite $0 < E_g < 5$ eV, sont appelés les semi-conducteurs intrinsèques. Ils sont caractérisés par une résistivité très supérieure à celle d'un bon conducteur et très inférieure à celle d'un bon isolant [9].

1.4.2 Le gap direct et indirect

a Semi-conducteur à gap direct :

C'est lorsqu'au maximum de la bande de valence et au minimum de la bande de conduction il correspond un même vecteur d'onde « k ». L'intérêt d'un gap direct est que les matériaux qui ont cette caractéristique sont plus utilisés dans des dispositifs optiques, les transitions sont directes.

b Semi-conducteur à gap indirect :

Les bandes de conduction et de valence sont décalées l'une par rapport à l'autre, donc différents. Alors on parle de gap indirect. Du coup, les matériaux ayant un gap indirect ne sont pas bien adaptés pour les dispositifs optiques (exemple silicium).

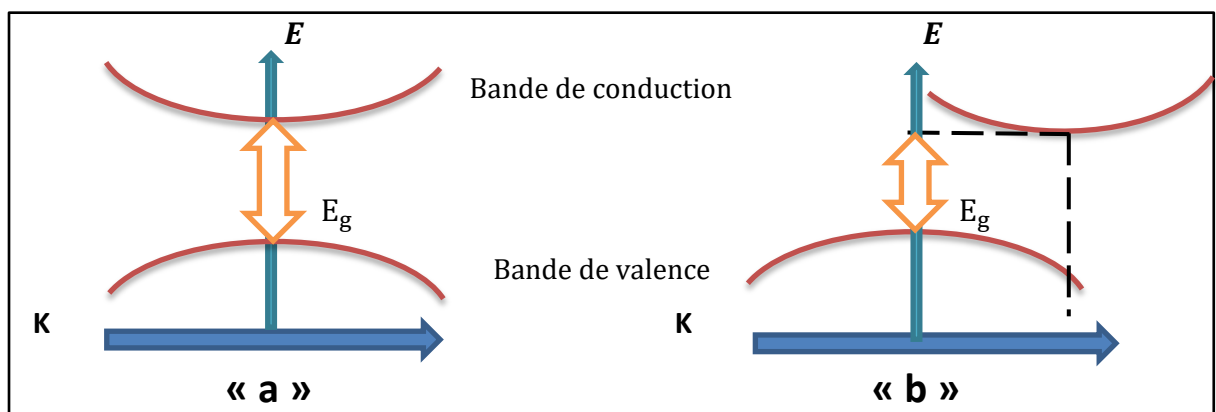


Figure 1.6 : Structure de bande schématique d'un s-c à gap direct (a) et à gap indirect (b).

1.5 Hétérostructure

1.5.1 Notion d'épitaxie

L'épitaxie est souvent réalisée entre deux matériaux de structures cristallines identiques, et dont les paramètres de maille sont peu différents. Si la différence est faible, on observe une épitaxie dite cohérente ; le matériau déposé s'adapte à la distance du plan atomique du substrat, et se déforme suivant les lois de l'élasticité.

Lorsque l'énergie élastique ainsi emmagasinée devient grande, on observe une relaxation des contraintes de désaccord de maille, soit par génération de défauts à l'interface, soit par un changement de la morphologie de la couche (formation d'îlots). L'apparition de ces défauts dégrade les propriétés électroniques du matériau [10].

1.5.2 Les puits quantiques

Un puits quantique est formé par une fine couche (quelques nm) d'un matériau Semi-conducteur de faible gap entouré de matériaux de plus grand gap. (Voir la figure 1.7). On réalise ainsi un puits de potentiel artificiel de taille quantique dans lequel les porteurs libres du semi-conducteur (électrons et trous) vont se retrouver confinés sur des niveaux d'énergie discrets. A chacune des énergies liées permises à l'intérieur du puits est associée une fonction d'onde dont le carré représente la densité de probabilité de présence sur le niveau d'énergie quantifiée. L'utilisation de puits quantiques au sein de la zone active engendre un confinement des électrons et des trous dans un plus faible volume, ce qui pour une injection donnée, permet d'augmenter la densité des porteurs et donc d'atteindre l'inversion de population plus facilement [11].

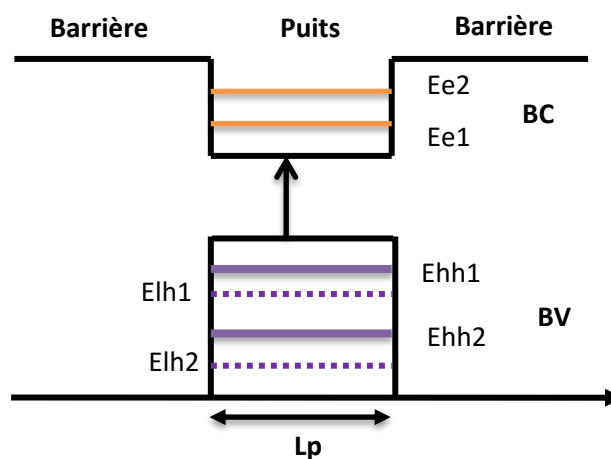


Figure 1.7 : Schéma d'une structure de puits quantique [12].

1.5.3 Les types de puits quantiques qui existent

a Puits quantiques de type-I

Les puits quantiques de type-I sont des puits où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau du puits (Voir la Figure 1.8) [12]

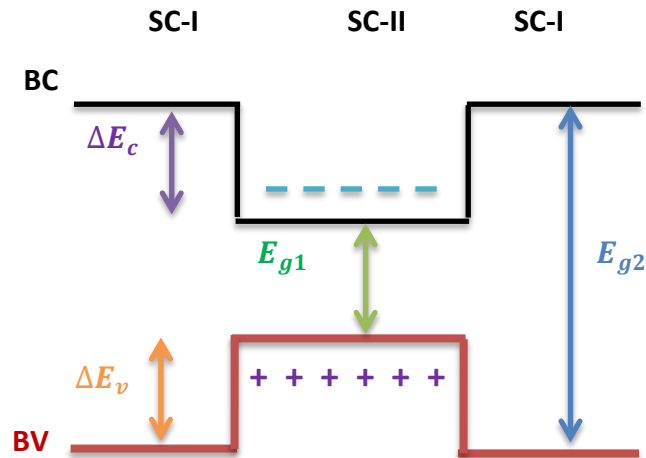


Figure 1.8 : Profil de puits quantique de type-I.

b Puits quantiques de type-II

Les puits quantiques de type-II sont des puits où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure (Voir la Figure 1.9) [12].

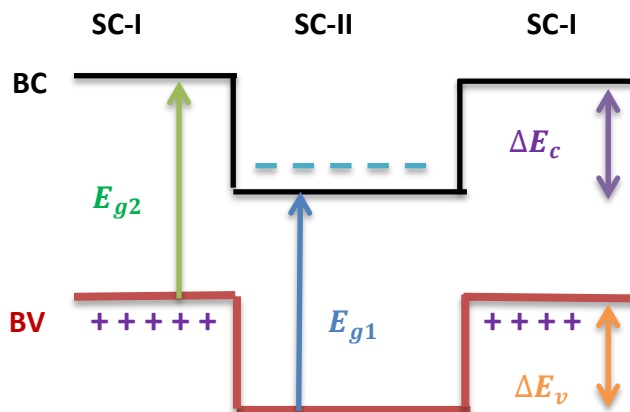


Figure 1.9 : Profil de puits quantique de type-II.

1.6 Les propriétés de l'absorption

Les photons peuvent réagir avec la matière de trois manières :

- l'absorption
 - l'émission spontanée
 - l'émission stimulée.
- 1- Dans le premier cas, un atome stable absorbe un photon (particule de lumière) et atteint un niveau d'énergie supérieur, il est excité.
 - 2- Le deuxième cas est la situation inverse. Un atome initialement excité retombe spontanément à un niveau d'énergie inférieur en émettant de la lumière.
 - 3- Enfin, dans le dernier cas, sous certaines conditions, la présence de lumière lors de la désexcitation d'un atome provoque l'émission d'autres photons qui ont alors les mêmes caractéristiques (longueur d'onde et direction) que celui qui était présent au départ. Pour que l'émission stimulée puisse avoir lieu, il faut qu'il y ait plus d'atomes excités que d'atomes dans le niveau de base. On parle alors d'une « inversion de population. Cet état correspond à une température absolue négative.

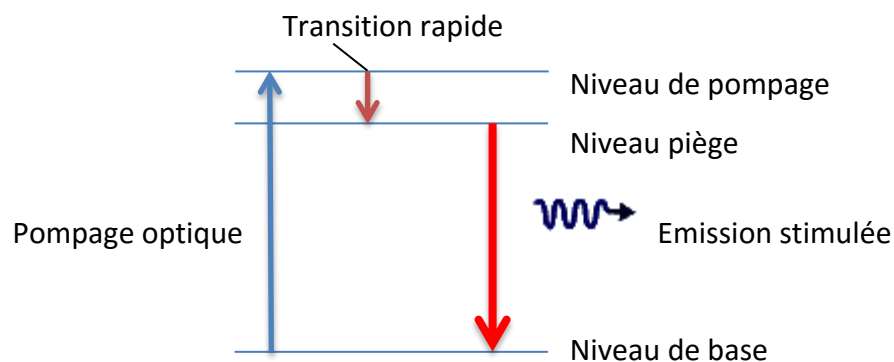


Figure 1.10 : Représentation de trois niveaux possibles des électrons d'un groupe d'atomes.

Représentation de trois niveaux possibles des électrons d'un groupe d'atomes :

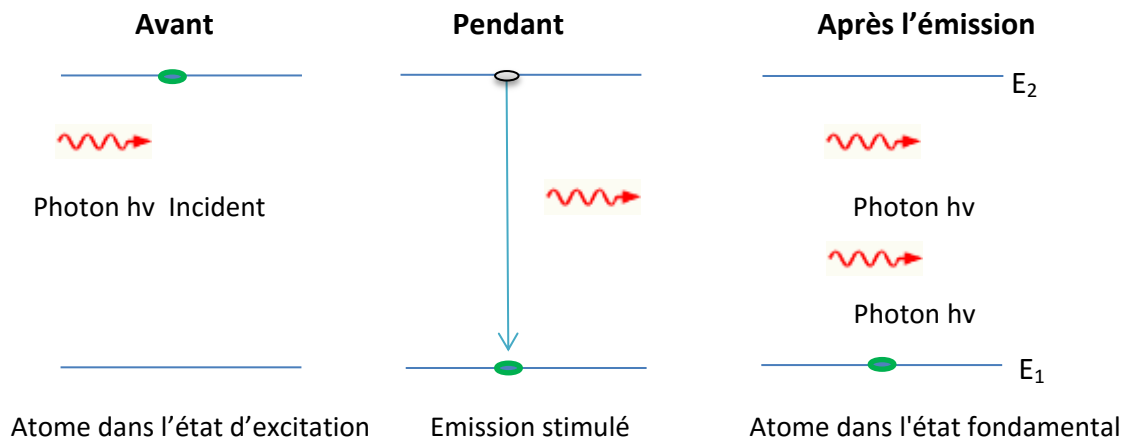


Figure 1.11 : Emission stimulé.

Un photon désexcite un électron dont le photon est émis en phase et s'ajoute au premier.

On peut obtenir de ce fait une réaction en chaîne de désexcitation des atomes qui conduit à l'émission d'une impulsion lumineuse de très grande puissance.

Le rubis est un cristal de corindon saphir (oxyde d'aluminium Al_2O_3) qui contient un faible pourcentage d'atomes de chrome. Le corindon « comprime » les atomes de chrome qui sont légèrement plus gros que les atomes d'aluminium, ce qui crée les conditions d'un système à 3 niveaux.

Le rubis est la seule pierre précieuse qui émet naturellement de la lumière. Le diamant, par exemple ne fait que réfracter et diffracter la lumière qu'il reçoit [1].

1.7 Choix de l'épitaxie $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y$

L'intérêt pratique des matériaux III-V est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne.

Comme nous venons de le voir, les composés III-V permettent de balayer une large plage de valeurs du gap, ce qui offre la possibilité de couvrir un large spectre de longueurs d'ondes, constituant ainsi, une propriété très importante du point de vue de l'optique.

L'incorporation d'une quantité diluée de Bi dans les semi-conducteurs III-V a montré qu'il y'a un grand potentiel en raison de la réduction de l'écart entre la bande de valence et la bande de conduction. Elle améliore aussi le fractionnement spin-orbite, le bismuth pouvant être théoriquement rapproché de l'antimoine Sb.

Les Alliages III-V-Bi ont suscité un intérêt pour des applications potentielles dans le domaine spectral infrarouge en raison de l'estimation que les alliages semi-conducteurs III-V, y compris semi-métalliques composés Bi-III, tels que GaAsN_{Bi}, pourraient conduire à des matériaux à gap de très faible bande [13].

Les alliages que nous étudions sont très prometteurs pour des applications optoélectroniques, tels que les lasers de forte puissance, opérant dans la plage 2 – 5 μm (0,62 – 0,25 eV) [14].

Le quaternaire utilise les effets cumulés par la diminution de l'énergie de la bande interdite, causée par l'Indium et le Bismuth, ce qui autorise une grande flexibilité en terme de cette énergie et par les états de contrainte, permettant ainsi la réalisation de lasers très efficaces sur le substrat *InGaSb*.

1.8 L'étude des paramètres électroniques

La loi de Végard est une loi empirique indiquant que les valeurs des propriétés d'un alliage (gap d'énergie, paramètre de maille, constantes élastiques, etc.) peuvent être déterminées par une interpolation linéaire des valeurs des propriétés de ses composants [15].

Pour le matériau $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y$ qui est un quaternaire de type 2+2, le calcul des différents paramètres par cette loi est comme suit :

$$p(x, y) = x(1 - y) * p(InSb) + x * y * p(InBi) + (1 - y) * (1 - x) * p(GaSb) + (1 - x) * y * p(GaBi) \quad I. 1$$

Pour le matériau $In_zGa_{1-z}Sb$ qui est un ternaire, le calcul des différents paramètres par cette loi est comme suit :

$$p(z) = z * p(InSb) + (1 - z) * p(GaSb) \quad I. 2$$

Où $p(x, y)$ et $p(z)$ sont les paramètres déterminés.

1.8.1 Le paramètre de maille

Le paramètre de maille « a » est égal à la distance entre deux atomes dans un cristal. Lorsqu'un atome étranger est introduit dans le réseau cristallin, il provoque en général une variation du paramètre cristallin qui se traduit par une expansion ou une contraction du réseau, fonctions de la taille des atomes. On dit que la variation de « a » obéit à la loi de Végard si elle est linéaire avec le taux de substitution x [16].

Nous avons utilisé la loi de Végard donnée par l'équation I.1 pour le calcul du paramètre de maille de l'épitaxie :

$$a_e(x, y) = x * (1 - y) * a(InSb) + x * y * a(InBi) + (1 - y) * (1 - x) * a(GaSb) + (1 - x) * y * a(GaBi) \quad I.3$$

Et ensuite la loi de Végard donnée par l'équation I.2 pour le calcul du paramètre de maille du substrat :

$$a_s(z) = z * a(InSb) + (1 - z) * a(GaSb) \quad I.4$$

1.9 La contrainte

les matériaux épitaxies ont des paramètres différents, mais pas trop éloignés. Lors de la croissance d'une couche semi-conductrice de paramètre de maille a_e différent de celui du substrat (plus épais) a_s , c'est le matériau support qui impose son paramètre de maille dans le plan de la couche. Par conséquent, la couche épitaxie devient le siège de contraintes en compression si ($a_e > a_s$) ou en tension si ($a_e < a_s$), entraînant ainsi une déformation tétragonale de sa maille :

Bi axiale : dans le plan de croissance : [17]

$$\varepsilon_{//} = \varepsilon_{xx}(x, y) = \varepsilon_{yy}(x, y) = \frac{a_s(z) - a_e(x, y)}{a_e(x, y)} \quad I.5$$

Uni axiale : dans la direction de croissance : [17]

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz}(x, y) = -2 \frac{C_{12}(x, y)}{C_{11}(x, y)} \varepsilon_{//} \quad I.6$$

où :

ε : La déformation ou le désaccord de maille.

a_s : Le paramètre de maille du substrat ($In_zGa_{1-z}Sb$) ou z est fixe (z=0.10).

a_e : Le paramètre de maille de la couche épitaxie ($In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y$).

c_{ij} : Les coefficients d'élasticité.

La condition nécessaire à une bonne hétéro-épitaxie est évidemment que les deux matériaux aient la même structure cristalline. Lorsque les paramètres de mailles sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte bi axiale dans le plan des couches.

Prenons le cas des deux cristaux comme le montre la figure 1.14.

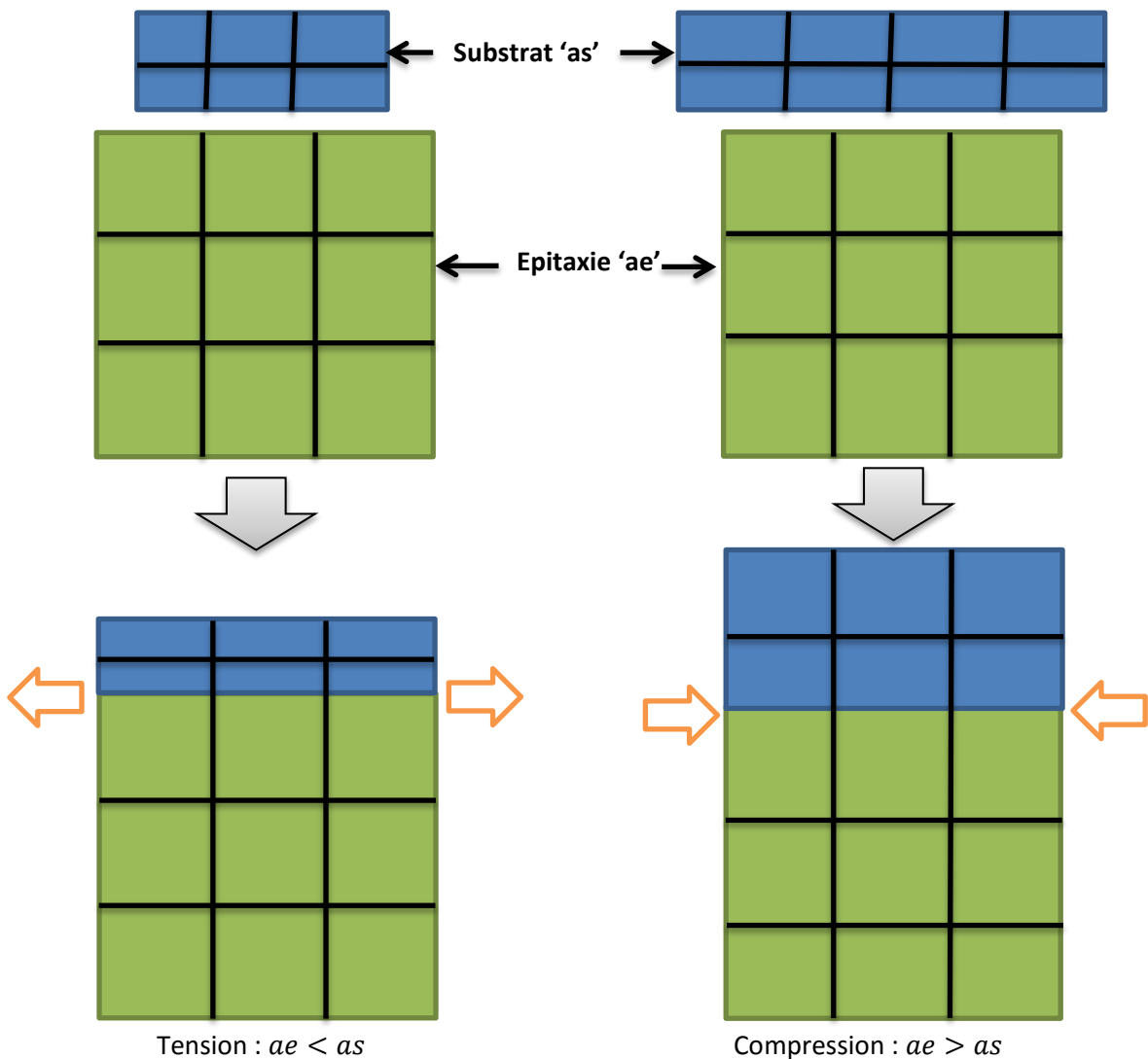


Figure 1.12 : les deux types de déformation tension et compression.

Tout matériau a un désaccord de maille qui va créer une déformation. Cette déformation donnera soit une tension, soit une compression, ceci dépendant du choix des matériaux et de leur poids.

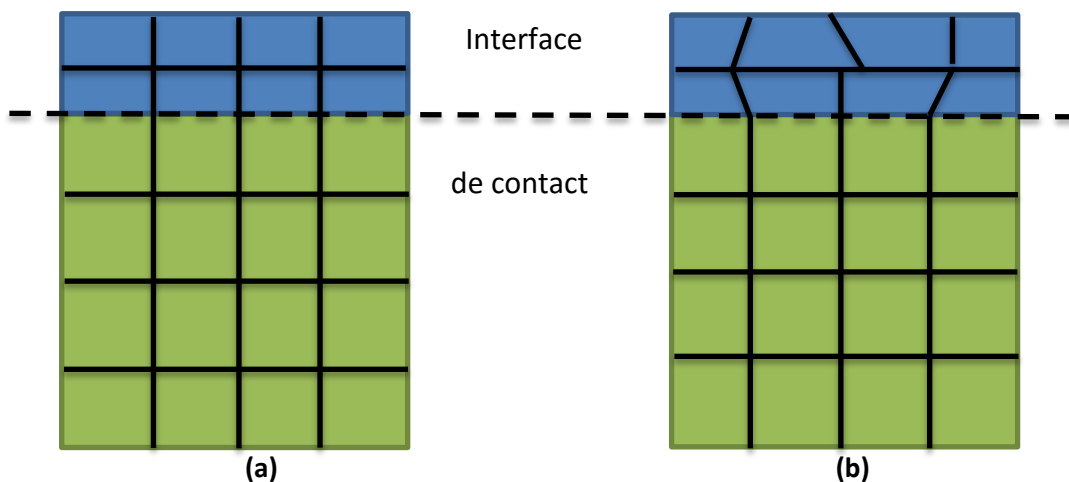
1.10 Epaisseur critique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, les couches de contraintes commencent à se relaxer, et génèrent des dislocations qui se propagent de l'interface de contact vers le quaternaire, et qui s'accompagnent d'une accumulation d'énergie élastique. Cette épaisseur limite est appelée épaisseur critique.

Pour une épaisseur épitaxiée supérieure à l'épaisseur critique, on peut observer un phénomène dit de relaxation. Ce phénomène peut être de deux types.

Donc deux cas peuvent se présenter : [18]

- Si $L < L_c$, l'épaisseur de la couche active est inférieure à une certaine épaisseur L_c appelée l'épaisseur critique. Le paramètre de maille du matériau couche épitaxie peut s'adapter à celui du substrat dans le plan de croissance grâce à une déformation élastique tétragonale de sa maille cristalline.
- Si $L > L_c$, des dislocations s'introduisent, on a une relaxation partielle.



Pour calculer l'épaisseur critique de notre système $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}_{1-y}\text{Bi}_y/\text{In}_z\text{Ga}_{1-z}\text{Sb}$, on a utilisé le modèle le plus classique, celui de K. Koksai et B. Gonul, qui traite le cas d'un matériau faiblement désaccordé par rapport au substrat (désaccord de maille <2%). Il définit l'épaisseur critique comme l'épaisseur à partir de laquelle une dislocation initialement présente à l'interface de contact se propage latéralement sous l'effet du champ de la contrainte. La valeur de l'épaisseur critique h_c qui en résulte sur la surface dans le cas d'un matériau de structure sphalérite (blende de zinc) épitaxie sur la surface (001) est donnée par l'équation suivante : [19]

$$h_c = \frac{a_e}{k \cdot \sqrt{2} \cdot \pi \cdot \Delta_a} \times \frac{1 - (0.25 \cdot \gamma)}{(1 + \gamma)} \times \ln \left(\frac{h_c \cdot \sqrt{2}}{a_e} + 1 \right) \quad \text{I.7}$$

où :

a_e : Paramètre de maille de la couche épitaxie.

Δ_a : Désaccord paramétrique.

γ : Coefficient de Poisson donné par :

$$\gamma = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad \text{I.8}$$

C_{ij} : Les coefficients élastiques (cm^{-2}).

k : est un coefficient qui prend les valeurs suivantes selon le type de la structure.

Structure	Couche unique	Puits quantique	Super réseau
k	4	2	1

Tableau 1.3 : Les coefficients élastiques selon le type de la structure.

1.11 Effet de Bismuth sur la bande de valence

Nous avons utilisé ce modèle pour déterminer l'influence du bismuth sur la bande de valence. Pour cela nous l'avons appliqué avec l'énergie de localisation du Bi « E_{Bi} » et le paramètre de couplage « C_{Bi} ». La résolution de l'équation aux valeurs propres, en remplaçant le V_{MN} par V_{PQ} et E_N par E_{Bi} , permet de déterminer les états propres des trous lourds et des trous légers [15] :

$$E_{v\pm} = \frac{1}{2} \left[E_{Bi} + E_V \pm \sqrt{(E_{Bi} - E_V)^2 + 4C_{pq}^2 * y} \right] \quad \text{I.9}$$
$$V_{PQ} = C_{pq} \sqrt{y}$$

Ou :

$$E_{Bi} = -0.4 \text{ eV}$$

$$C_{pq} = 1.6$$

y : Fraction de Bismuth.

1.12 Effet de la contrainte

1.12.1 Effet de la contrainte sur le gap

Pour la description du rôle de la contrainte sur la structure des bandes, nous avons suivi le modèle de van walle, et utilisé le formalisme de Krijn.

Les deux composantes parallèle et perpendiculaire du tenseur de déformation peuvent être définies de la manière suivante [19], dans l'équation I.5 et I.6.

Le rôle de la contrainte bi axiale sur la structure des bandes de la couche épitaxiée est schématisé sur la figure 1.14. Celle-ci présente la structure de bande d'un semi-conducteur à gap direct en l'absence de contrainte (figure 1.14-a), soumis à une compression bi axiale (figure 1.14-b) et soumis à une contrainte bi axiale de tension (figure 1.14-c).

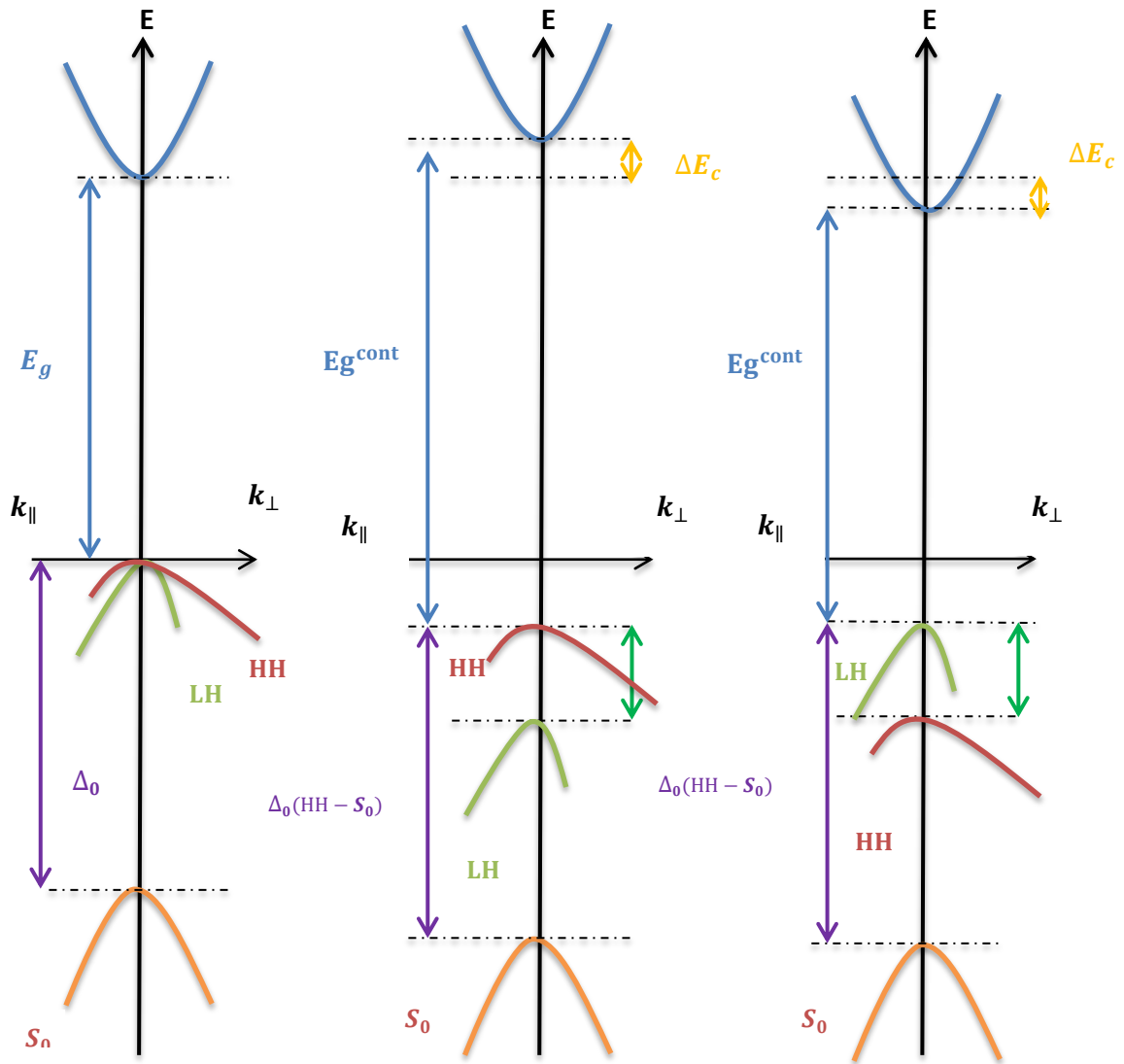


Figure 1.14 : Structure de bande d'un semi-conducteur à gap directe.

a) non contraint b) en compression c) en tension

En l'absence de contrainte, les bandes de trous lourds et trous légers sont isotropes et dégénérées au centre de la zone de Brillouin, et la bande de trous spin-splittée est située à une énergie en dessous de ces deux bandes figure (1.14-a).

$$E_{V,moy} = \frac{E_{HH} + E_{LH} + \Delta_0}{3} \quad \text{I. 10}$$

Avec :

E_{HH} : Energie de la bande de trous lourds.

E_{LH} : Energie de la bande de trous légers.

Δ_0 : Energie de décalage des bandes des trous spin-splittée.

L'effet de la contrainte sur les bandes de valence et de conduction peut être décomposé en deux parties :

La composante hydrostatique : Liée à la déformation selon l'axe de croissance (Oz), provoque un décalage du centre de gravité de la bande de valence ainsi que du centre de gravité de la bande de conduction.

La contrainte de cisaillement : Qui élève la dégénérescence des états énergétique des trous lourds et des trous légers en $k = 0$ (typiquement d'une valeur $\Delta_{0(hh-lh)}$ de 60 – 80 MeV pour un désaccord paramétrique de 1%).

Pour une couche soumise à une contrainte bi axiale de compression, la composante hydrostatique augmente le gap moyen entre les bandes de conduction et de valence, alors que la composante de cisaillement rend les bandes de valence fortement anisotropes : la bande de plus haute énergie (improprement appelée bande HH) devient "lourde" selon k_{\perp} et "légère" selon k_{\parallel} . La bande d'énergie inférieure (improprement appelée bande LH) devient elle "légère" selon k_{\perp} et "lourde" selon k_{\parallel} .

Si la couche est soumise à une contrainte bi axiale de tension, le gap moyen diminue et les bandes de valences sont inversées par rapport à celles d'une couche en compression, la bande de plus haute énergie (bande LH) restant "légère" selon k_{\perp} , et "lourde" selon k_{\parallel} .

Les décalages en énergie des centres de gravité de la bande de valence et de la bande de conduction en $k=0$ varient proportionnellement à la contrainte [24]:

$$\Delta E_{v,moy}^{hyd} = a_v(2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \quad \text{I. 11}$$

$$\Delta E_c^{hyd} = a_c(2\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \quad \text{I. 12}$$

Avec a_c et a_v les potentiels hydrostatiques de déformation, respectivement, pour la bande de conduction et la bande de valence.

Les décalages énergétiques induits par la contrainte de cisaillement pour chacune des bandes constituant la bande de valence sont les suivants [20]:

$$\Delta E_{hh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \times \delta E^{cisa} \quad \text{I. 13}$$

$$\Delta E_{lh}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad \text{I. 14}$$

$$\Delta E_{so}^{cisa} = -\frac{1}{2} \Delta_0 + \frac{1}{4} \delta E^{cisa} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \delta E^{cisa} + \frac{9}{4} (\delta E^{cisa})^2} \quad \text{I. 15}$$

Avec

$$\delta E^{cisa} = 2 \cdot b \cdot (\mathcal{E}_{\parallel} + \mathcal{E}_{\perp}) \quad \text{I. 16}$$

Où b est le potentiel de déformation tétragone.

1.13 Les états énergétiques dans un puits quantique

Dans un puits quantique, les porteurs de charge sont confinés à des niveaux énergétiques différents et pour définir ces valeurs propres d'énergie, on va étudier le comportement d'une particule confinée dans un puits de potentiel unidimensionnel et d'une largeur L selon la direction de l'axe x. L'équation de Schrödinger indépendante du temps peut être écrite [21] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = E_n \varphi(x) \quad \text{I. 17}$$

Avec :

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \quad \text{I. 18}$$

h : Constante de Planck.

m^* : La masse effective.

φ : La fonction d'onde.

$V(x)$: Fonction décrivant le potentiel pour chaque valeur de x.

E_n : L'énergie de quantification (m_e, m_{hh}, m_{lh}).

1.13.1 Puits de profondeur infinie

Pour une particule dans un puits infiniment profond de longueur L (figure 1.15), où le potentiel est nul à l'intérieur du puits et vaut l'infini à l'extérieur, quel que soit l'énergie de cette dernière elle reste confinée dans le puits.

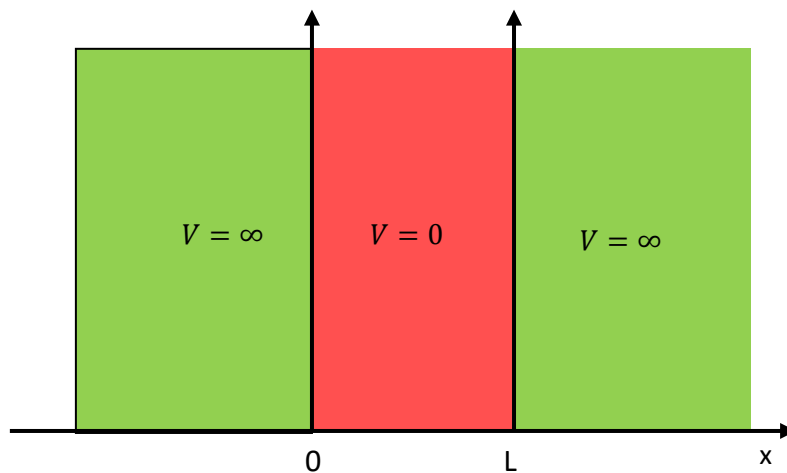


Figure 1.15 : puits de potentiel rectangulaire infiniment profond.

La particule ne peut pas se trouver dans la région où V est infini, car celle aurait alors une énergie infinie, et pour que l'équation de Schrödinger soit vérifiée à l'extérieur du puits (où $V = \infty$), le produit $V(x)\varphi(x)$ doit être nul et cela n'est possible que pour $\varphi(x) = 0$.

Dans le puits ($0 < x < L$), le potentiel est nul, l'équation I.19 devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} = E_n \varphi(x) \quad \text{I.19}$$

Les solutions de cette équation différentielle sont de la forme :

$$\varphi(x) = \sin kx \quad \text{I.20}$$

$$\varphi(x) = \cos kx \quad \text{I.21}$$

Avec :

$$k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad \text{I.22}$$

L'équation I.19 a comme solution générale :

$$\varphi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

I.23

Et pour déterminer A et B, on introduit les conditions aux limites (0 et L)

- Première barrière :

➤ Au point 0 (coté V infini)

$$\varphi(0) = 0 \quad (a1)$$

➤ Au point 0 (coté V nul)

$$\varphi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B \quad (a2)$$

Donc des équations a1 et a2 on obtient

$$B = 0$$

- deuxième barrière :

➤ Au point L (coté V infini)

$$\varphi(L) = 0 \quad (b1)$$

➤ Au point L (coté V nul)

$$\varphi(L) = A \sin kL + B \cos kL$$

Et comme B=0 on obtient :

$$\varphi(L) = A \sin kL \quad (b2)$$

De b1 et b2, on aura :

$$A \sin kL = 0$$

A ne peut pas être nul. Si on suppose $A = 0$, la fonction d'onde sera nul sur tout l'espace x, ce qui est faux avec la présence d'une particule, donc la solution est $\sin kL = 0$

$$\sin kL = 0 \Rightarrow k = k_n = \frac{n\pi}{L} \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Et comme $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ on aura :

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2mL^2} ; n = 1, 2, \dots, \infty \quad (\text{I. 24})$$

L'énergie est quantifiée. L'état d'énergie le plus bas dans le puits est appelé état fondamental pour $n=1$, et les états d'énergie pour $n>1$ sont appelés états excités.

1.13.2 Puits quantique de profondeur finie

Le potentiel carré délimite les trois régions suivantes :

$$\begin{cases} \text{Région 1 pour } z < 0, & V(z) = V_0 \\ \text{Région 2 pour } 0 < z < L_1, & V(z) = 0 \\ \text{Région 3 pour } z > L_1, & V(z) = V_0 \end{cases}$$

Les équations de Schrödinger relatives aux trois régions et les solutions correspondantes $\Psi_1(z), \Psi_2(z), \Psi_3(z)$ sont :

$$\begin{cases} (d^2\Psi_1/dz^2) - K_2^2\Psi_1 = 0 \\ (d^2\Psi_2/dz^2) - K_1^2\Psi_2 = 0 \\ (d^2\Psi_3/dz^2) - K_2^2\Psi_3 = 0 \end{cases} \quad (\text{I. 25})$$

Avec :

$$\begin{cases} K_1 = \frac{\sqrt{2m_1^*E}}{\hbar} \\ K_2 = \frac{\sqrt{2m_2^*(V_0 - E)}}{\hbar} \end{cases} \quad (\text{I. 26})$$

Où :

m_1^* : Est la masse effective de semi-conducteur SC_1 dans la région 2.

m_2^* : Est la masse effective de semi-conducteur SC_2 dans les deux régions 1 et 3.

Les solutions des équations de Schrödinger dans les trois régions sont :

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= A_1 e^{K_2 z} + B_1 e^{-K_2 z} \\
\Psi_2 &= A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\
\Psi_3 &= A_3 e^{K_2(z-L_1)} + B_3 e^{-K_2(z-L_1)}
\end{aligned}
\tag{I.27}$$

La condition aux limites $\begin{cases} \Psi_1(z \rightarrow -\infty) = 0 \Rightarrow B_1 = 0 \\ \Psi_3(z \rightarrow +\infty) = 0 \Rightarrow A_3 = 0 \end{cases}$

$$\begin{cases} \Psi_1 = A_1 e^{K_2 z} \\ \Psi_2 = A_2 e^{jK_1 z} + B_2 e^{-jK_1 z} \\ \Psi_3 = B_3 e^{(-K_2(z-L_1))} \end{cases}
\tag{I.28}$$

Les constantes d'intégration A_1, A_2, B_2, B_3 sont déterminées par les conditions aux limites. Ces conditions sont les continuités de la fonction d'onde Ψ et du courant de probabilités $(1/m) \cdot d\Psi(z)/dz$ aux interfaces $z=0$ et $z=L_1$.

En $z=0$

- $\Psi_1(0) = \Psi_2(0)$
- $(1/m_1^*) \cdot d\Psi_1(0)/dz = (1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(0)/dz$

(I.29)

On obtient

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \end{cases}
\tag{I.30}$$

En $z=L_1$

- $\Psi_2(L_1) = \Psi_3(L_1)$
- $(1/m_2^*) \cdot d\Psi_2(L_1)/dz = (1/m_1^*) \cdot d\Psi_3(L_1)/dz$

(I.31)

On obtient

$$\begin{cases} A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-jK_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases}
\tag{I.31}$$

D'où le système d'équations

$$\begin{cases} A_1 - A_2 - B_2 = 0 \\ (K_2/m_1^*) \cdot A_1 - j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 + j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 = 0 \\ A_2 e^{jK_1 L_1} + B_2 e^{-K_1 L_1} - B_3 = 0 \\ j(K_1/m_2^*) \cdot A_2 e^{jK_1 L_1} - j(K_1/m_2^*) \cdot B_2 e^{-jK_1 L_1} + (K_2/m_1^*) \cdot B_3 = 0 \end{cases} \quad (\text{I. 32})$$

Ce système admet des solutions non nulles, si son déterminant est nul

$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 & -1 \\ K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) & 0 & j(K_1/m_2^*) \\ 0 & e^{jK_1 L_1} & -1 & e^{-K_1 L_1} \\ 0 & j(K_1/m_2^*) e^{jK_1 L_1} & K_2/m_1^* & -j(K_1/m_2^*) e^{-jK_1 L_1} \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{I. 33})$$

D'où l'équation :

$$\sqrt{2m_2 E_n / \hbar^2} \cdot L_1 = n \cdot \pi + 2 \text{Arc tan}[\sqrt{m_2(V_0 - E_n) / m_1 E_n}] \quad (\text{I. 34})$$

Les valeurs propres E_n correspondantes à chaque entier n sont déterminées à partir de l'équation (1.34), ainsi appelée équation aux valeurs propres.

1.14 Energie de transition

Dans un puits quantique, les niveaux énergétiques sont quantifiés et l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence vers la bande de conduction appelée l'énergie de transition (Figure 1.18) est donnée par la relation suivante :

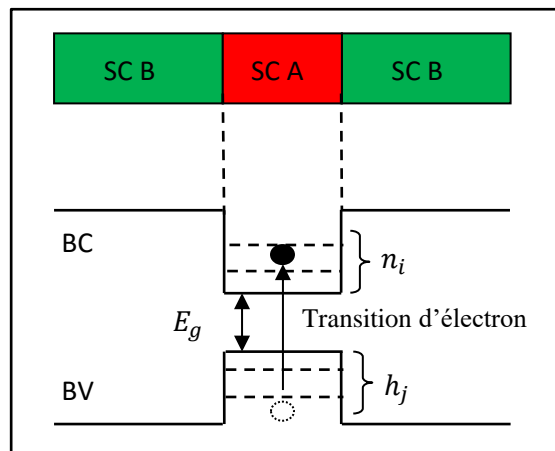


Figure 1.16 : Energie de transition dans un puits quantique.

$$E_{tr_{i,j}} = E_g + E_{n_i} + E_{h_j} ; i = 1,2, \dots, n , j = 1,2, \dots, n$$

I.24

Avec

E_{n_i} : Niveaux d'énergie dans la bande de conduction.

E_{h_j} : Niveaux d'énergie dans la bande de valence.

1.15 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté quelques éléments essentiels sur les semi-conducteurs III-V, particulièrement, sur le gap d'énergie, les notions sur Système cristallin et les puits quantiques.

Après nous avons mentionné les notions fondamentales de l'absorption, ensuite on a expliqué la quantification, l'énergie de transition et la longueur d'onde.

Enfin, on a fait l'étude sur le matériau *GaInSbBi* et décrit ces propriétés optiques.

Le chapitre suivant aura pour objet de présenter les résultats de la simulation et leur discussion.

Chapitre 2 Résultat et discussion

2.1 Introduction

Ce chapitre consiste à présenter et à examiner les résultats de notre étude sur le matériau InGaSbBi pour déterminer les meilleures concentrations de l'indium et le bismuth qui nous permet de réaliser une meilleur émission laser.

2.2 L'étude de paramètre de maille

2.2.1 Le paramètre de maille du substrat

La figure 2.1 montre l'évolution du paramètre de maille $In_zGa_{1-z}Sb$ en fonction de la concentration de l'indium et on note que pour toute augmentation de z, on a une augmentation de a. Pour notre étude on va fixer Z a 10 % car l'indium « **In** » coûte très cher et aussi pour avoir un substrat au voisinage de l'alliage quaternaire.

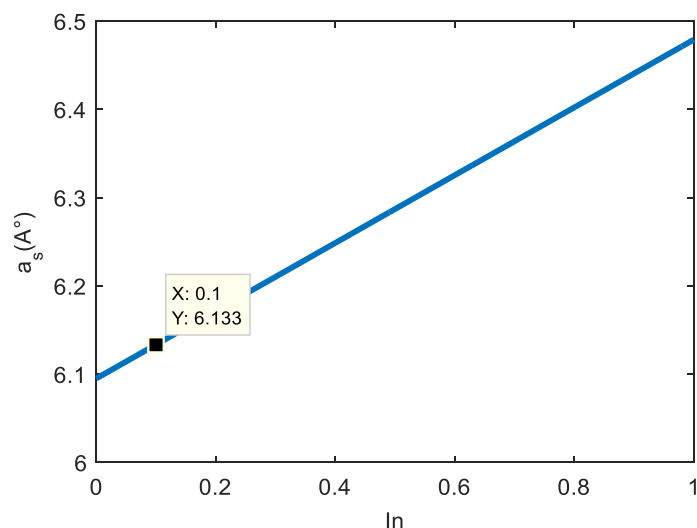


Figure 2.1 : Variation du paramètre de maille (Å) du substrat $In_zGa_{1-z}Sb$ en fonction de la concentration d'indium.

2.2.2 Calcul de delta Eg

Dans la figure 2.2 illustre ΔE_g en fonction de la concentration de l'indium (z) et le bismuth (y) et on remarque que lorsque la concentration de l'indium augmente l'énergie de gap augmente légèrement mais lorsque la concentration de bismuth augmente, on a une augmentation de ΔE_g . On prend un exemple. Pour $z(x)=10\%$ et $y=2\%$, $\Delta E_{g1} = 0.101 eV$ et pour $y=12\%$, $\Delta E_{g2} = 0.328 eV$. Si on calcule le delta, on trouve $\Delta_1=E_{g2}-E_{g1}=0.227 eV$ et si on augmente après le $z(x)=20\%$, $y=2\%$, le $\Delta E_{g1} = 0.0145 eV$ et lorsque $y=12\%$, $\Delta E_{g2} = 0.242 eV$. Le delta est égal à $\Delta_2=E_{g2}-E_{g1}=0.2265 eV$ et pour $z(x)=30\%$ $y=2\%$, $\Delta E_{g1} = -0.083 eV$. Pour $y=12\%$, $\Delta E_{g2} = 0.212 eV$ et on calcule le delta $\Delta_3=E_{g2}-E_{g1}=0.295 eV$. On remarque que l'effet de l'indium diminue l'énergie de la barrière légèrement, au contraire de bismuth qui augmente l'énergie de la bande de conduction.

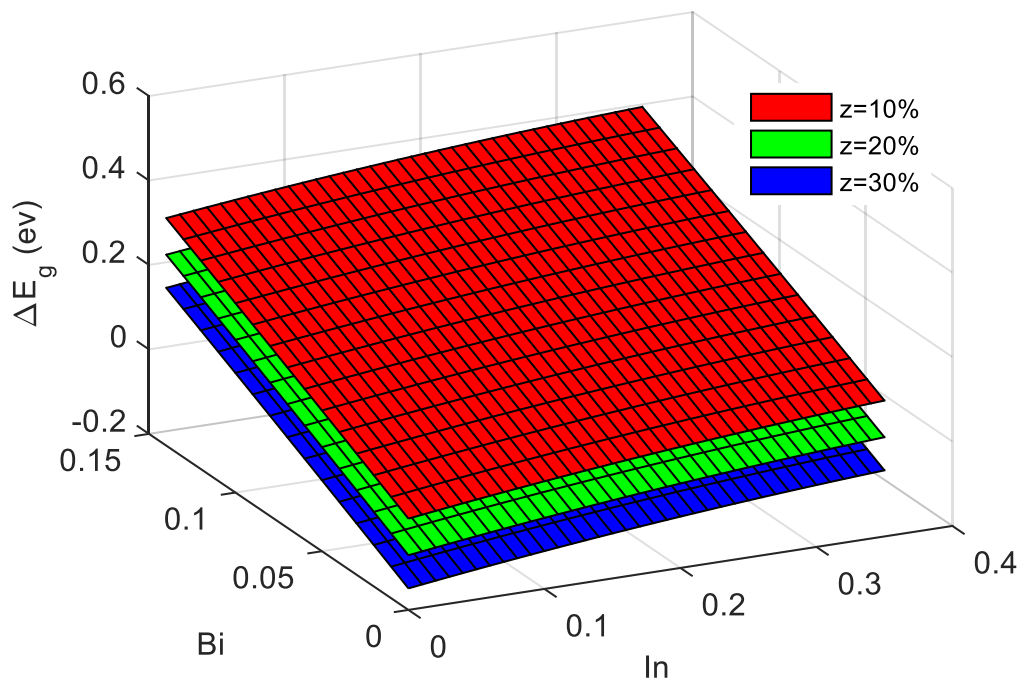


Figure 2.2 : L'évolution de ΔE_g en fonction de la concentration d'indium et du bismuth.

2.2.3 Le paramètre de maille de la couche d'épitaxie

La figure 2.3 montre le paramètre de maille en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth. On remarque que le bismuth a pour conséquence d'augmenter légèrement le paramètre de maille. Ainsi pour $y=2\%$, $a=6.1 \text{ \AA}$; pour $y=4\%$, $a=6.108 \text{ \AA}$; pour $y=6\%$, $a=6.109 \text{ \AA}$ et pour $y=10\%$, $a=6.118 \text{ \AA}$. Par contre l'indium augmente fortement le paramètre de maille. Par exemple pour $\text{In}(x=10\%)$ on aura $a=6.16 \text{ \AA}$, pour $x=20\%$ on aura $a=6.199 \text{ \AA}$ et pour $x=30\%$ on aura $a=6.237 \text{ \AA}$.

Si on calcule les Delta du Bismuth ($\Delta_{y1}=y_2-y_1=0.008 \text{ \AA}$, $\Delta_{y2}=y_2-y_1=0.009 \text{ \AA}$, $\Delta_{y3}=y_3-y_1=0.018 \text{ \AA}$) et les Delta de l'indium ($\Delta_{x1}=x_2-x_1=0.039 \text{ \AA}$ et $\Delta_{x2}=x_2-x_1=0.077 \text{ \AA}$), on constate que l'indium est plus influent sur le paramètre de maille que le bismuth

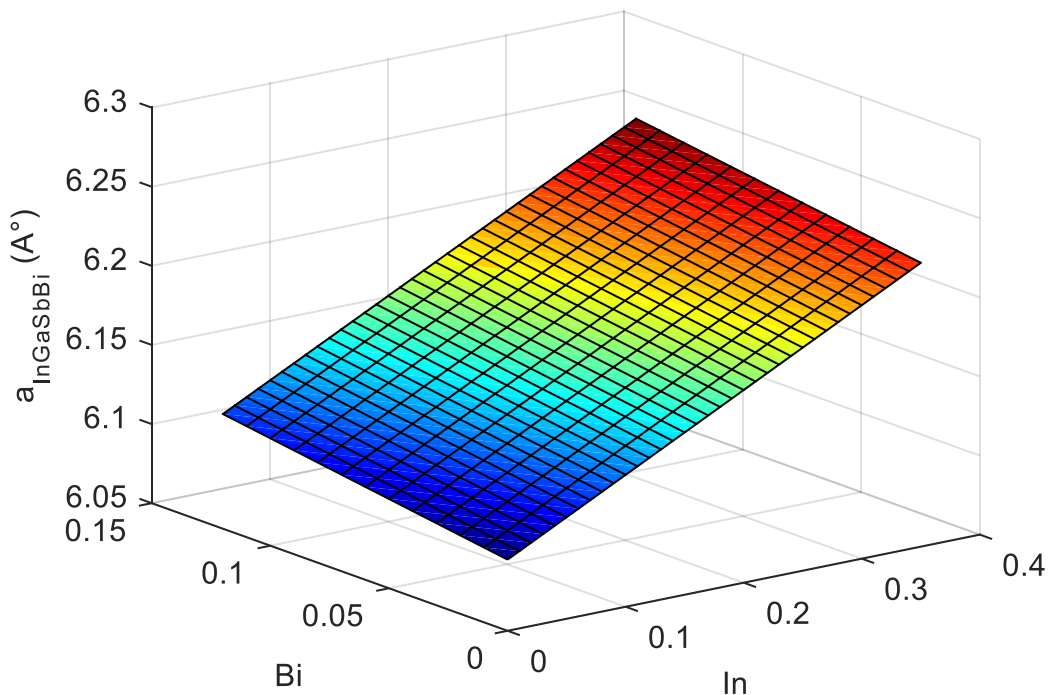


Figure 2.3 : Variation du paramètre de maille du $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}_{1-y}\text{Bi}_y$ en fonction de la concentration d'Indium et de Bismuth.

2.3 Calcul de la contrainte

La figure 2.4 représente le désaccord de maille en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth. On remarque que les deux matériaux sont en accord de

maille, car la contrainte est faible et ne dépasse pas le 1%. On distingue aussi qu'il y a deux types de contrainte, une contrainte positive qui est une tension et une contrainte négative qui est une compression. On remarque que, lorsque la concentration de l'Indium augmente, ϵ décroît rapidement et qu'une augmentation de la concentration du bismuth induit une diminution lente de ϵ .

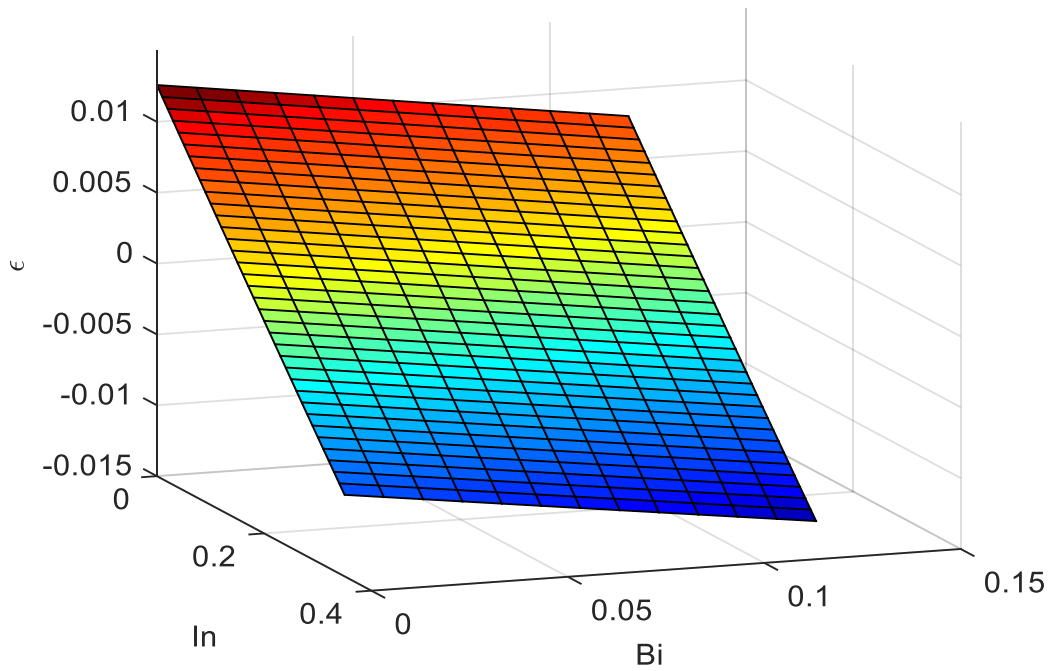


Figure 2.4 : Désaccord de maille en fonction de la variation de l'indium et bismuth.

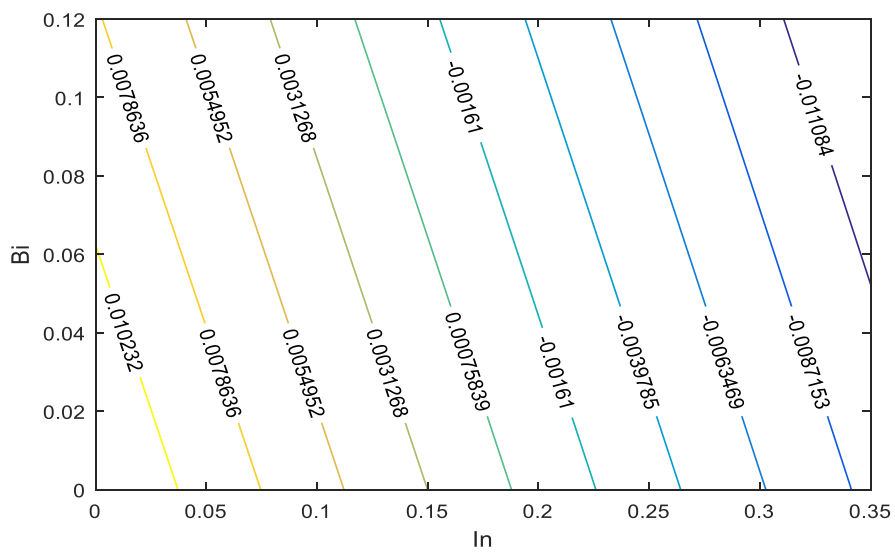


Figure 2.5 : Désaccord de maille en fonction de la variation de l'indium et bismuth (model ISO).

2.4 Calcul de l'épaisseur critique

La figure 2.6 représente la variation de l'épaisseur critique en fonction de l'indium et du bismuth. On remarque qu'à $x=0.1$, on a un accord de maille. On remarque aussi que lorsque la concentration de l'indium augmente, on a une contrainte compressive et que lorsqu'elle diminue, on a une contrainte tension.

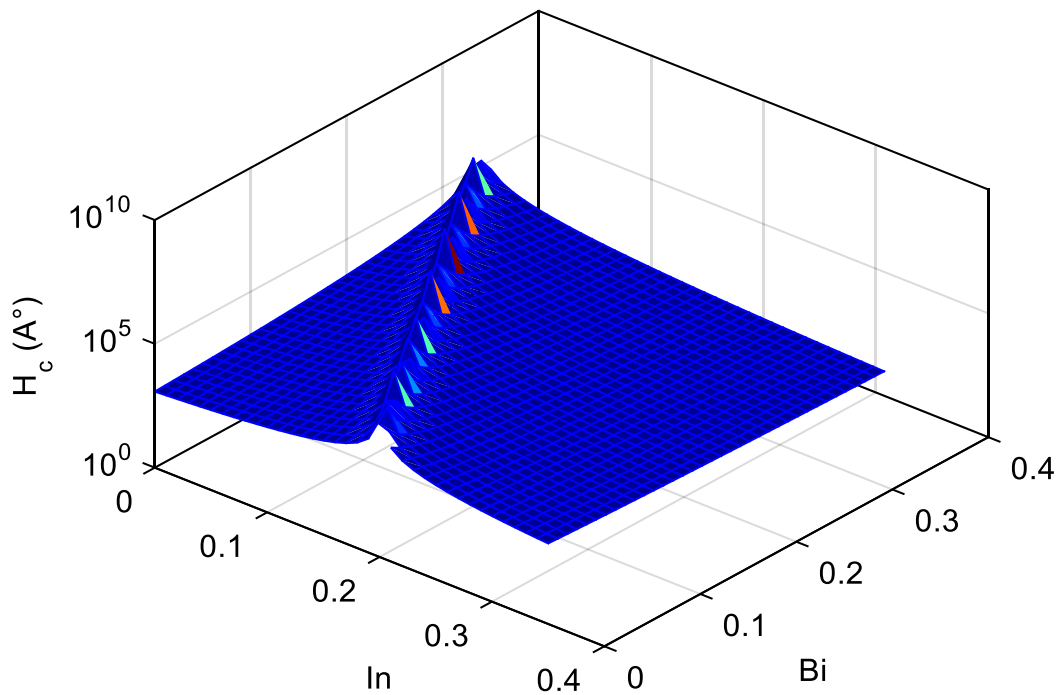


Figure 2.6 : Variation de l'épaisseur critique en fonction d'indium et du bismuth.

2.5 Effet de l'éclatement sur la bande de valence

La figure 2.7 présente l'éclatement de la bande de valence en fonction de la concentration de bismuth. On voit qu'il y a un fort éclatement d' E_v^+ et que lorsque la concentration de bismuth augmente, on a une augmentation de l'énergie de valence. Par exemple pour $\gamma=2\%$ on a $E_v^+ = 0.4034\text{eV}$, $\gamma=6\%$ $E_v^+ = 0.4103\text{eV}$ et $\gamma=10\%$ $E_v^+ = 0.4172\text{eV}$ alors que l'indium n'a aucun effet sur la bande de valence. Pour toute les valeurs de x , E_v^+ reste constant ($E_v^+ = 0.4\text{eV}$).

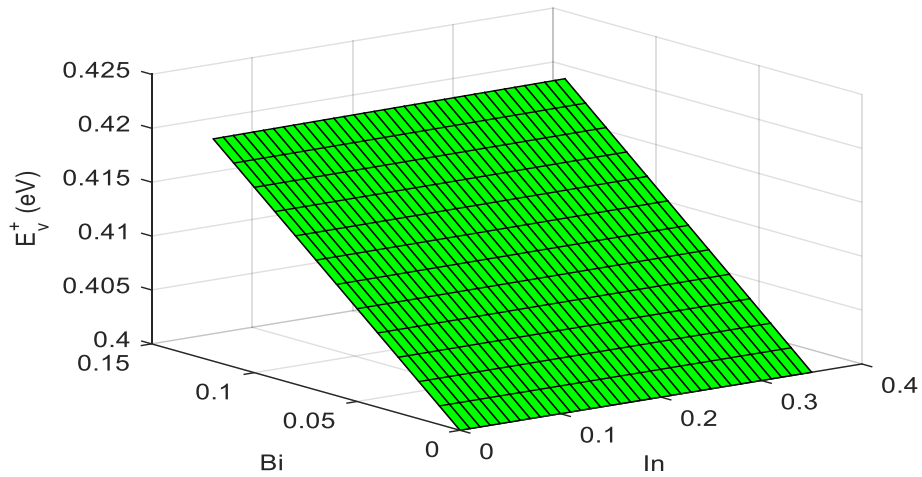


Figure 2.7 : Eclatement de la bande de valence en fonction de l'indium et bismuth.

La figure 2.8 illustre l'éclatement de la bande de valence en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth. On note un fort éclatement d' E_v^- et on relève qu'on a une diminution de l'énergie de la bande de valence lorsque la concentration de bismuth croît. Par exemple pour $y=2\%$ on a $E_v^- = -5.601\text{eV}$, pour $y=6\%$, $E_v^- = -5.608\text{eV}$ et pour $y=10\%$, $E_v^- = -5.616\text{eV}$. Par contre l'augmentation de l'indium induit une augmentation de l'énergie de la bande de valence lorsque sa concentration croît. Par exemple si : $x=10\%$ $E_v^- = -5.597\text{eV}$, $x=20\%$ $E_v^- = -5.561\text{eV}$ et $x=30\%$ $E_v^- = -5.544\text{eV}$.

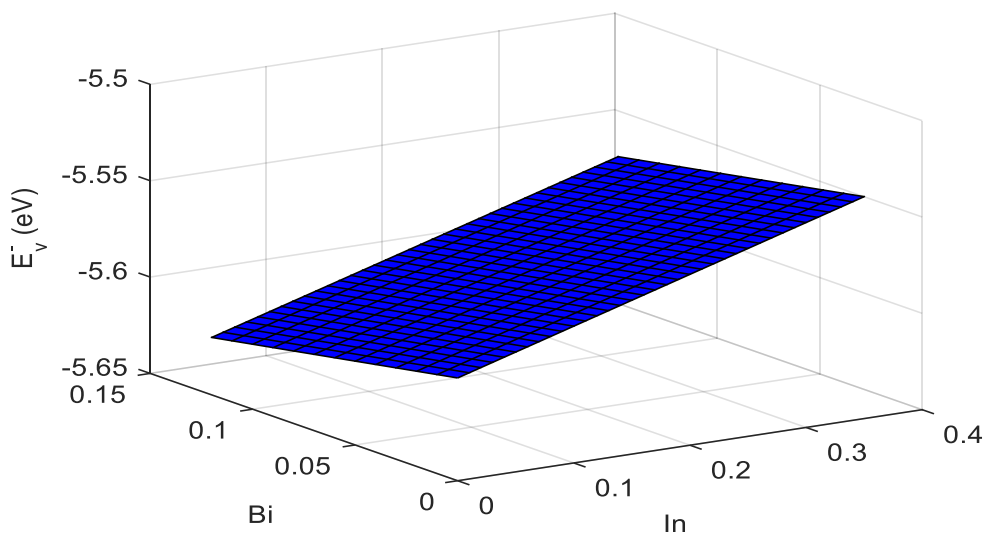


Figure 2.8 : Eclatement de la bande de valence en fonction de l'indium et bismuth.

2.6 Effet de la contrainte

2.6.1 Effet de la contrainte sur la bande de conduction

La figure 2.9 montre l'effet de la contrainte sur la bande de conduction en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth. On remarque que lorsque la concentration de bismuth augmente, l'énergie de la bande de conduction diminue fortement. De même, une concentration de l'indium entraîne une faible diminution de l'énergie de la bande de conduction.

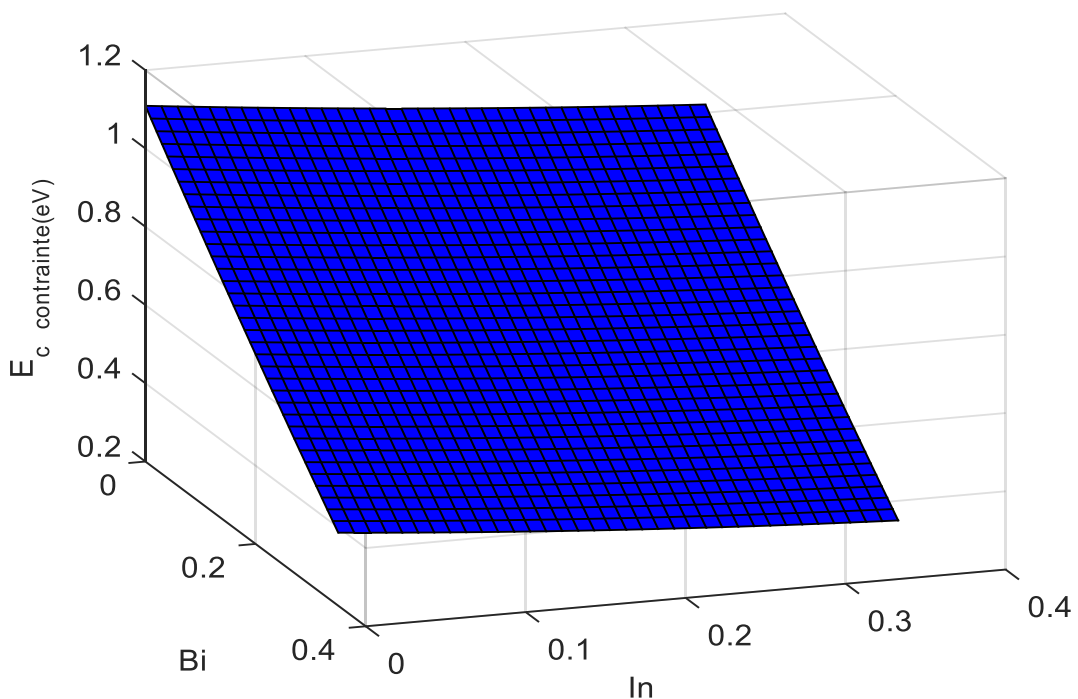


Figure 2.9 : Effet de la contrainte sur la bande de conduction en fonction de la concentration de l'indium et bismuth.

2.6.2 Effet de la contrainte sur la bande de valence

La figure 2.10 illustre l'effet de la contrainte sur la bande de valence. On aperçoit que la bande a éclaté en deux niveaux E_vhh et E_vlh et on voit que lorsque les concentrations de l'indium et du bismuth augmentent, les deux énergies des trous lourds et trous légers diminuent et ceci en relation avec l'effet du bismuth qui diminue le gap.

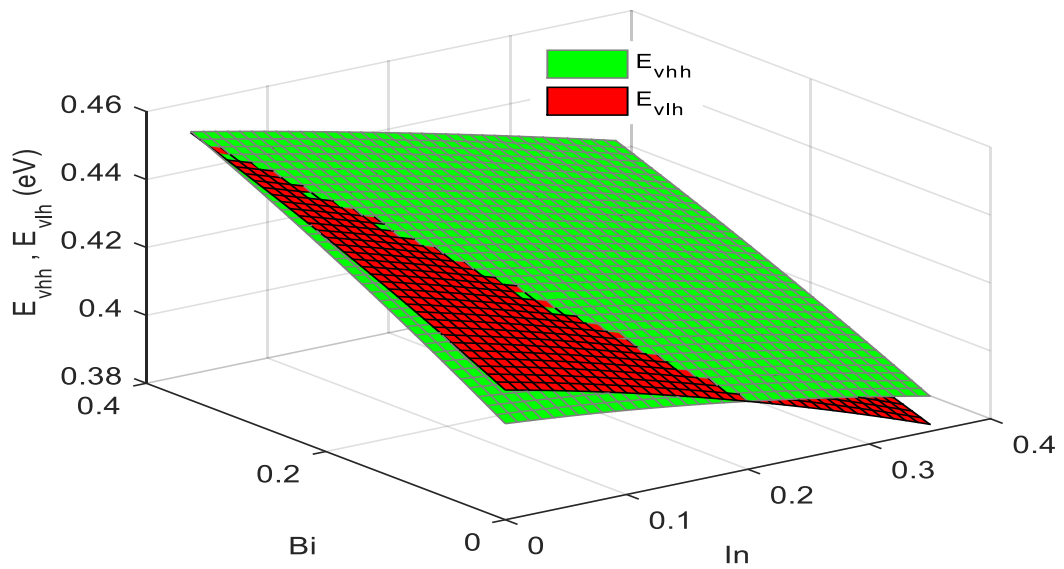


Figure 2.10 : Effet de la contrainte sur la bande de valence en fonction de la concentration de l'indium et bismuth.

La figure 2.11 représente l'effet de la contrainte sur le gap. On remarque qu'il y a un faible éclatement. Ceci est dû à la contrainte qui est faible et qui ne dépasse pas les 0.018% et on s'aperçoit que l'effet de bismuth est plus important que l'effet de l'indium car l'augmentation de la concentration de bismuth diminue fortement le gap.

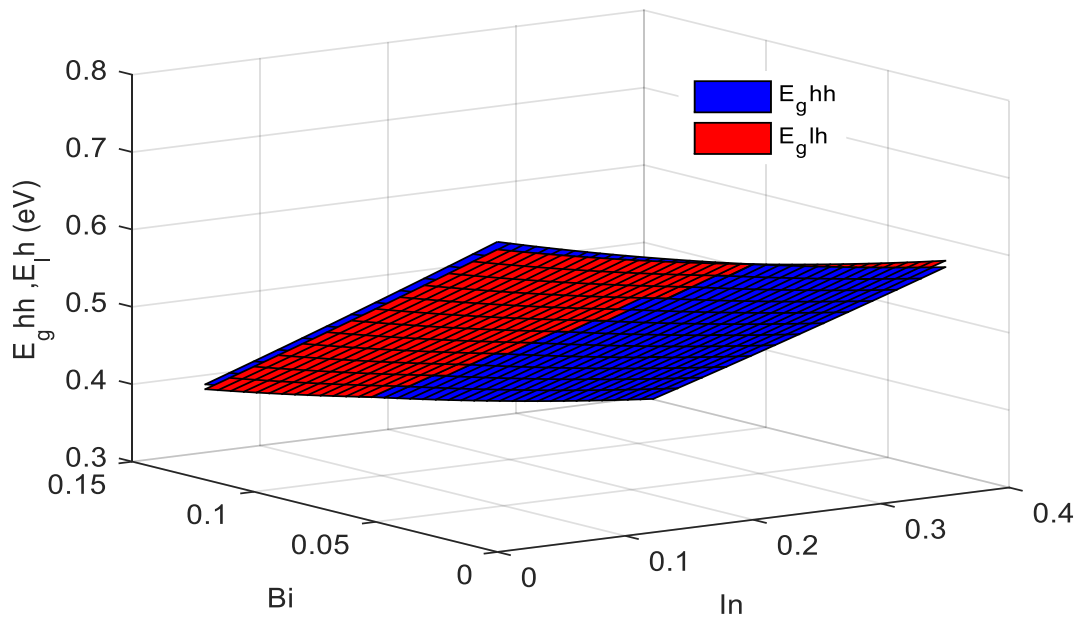


Figure 2.11 : Effet de la contrainte sur l'énergie de la bande interdite en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth.

2.6.3 Effet de la contrainte sur la barrière de conduction et de valence

La figure 2.12 illustre l'effet de la contrainte sur la barrière de conduction. On observe que lorsque la concentration de l'indium augmente, l'énergie de la bande de conduction augmente. On aboutit au même résultat pour le bismuth.

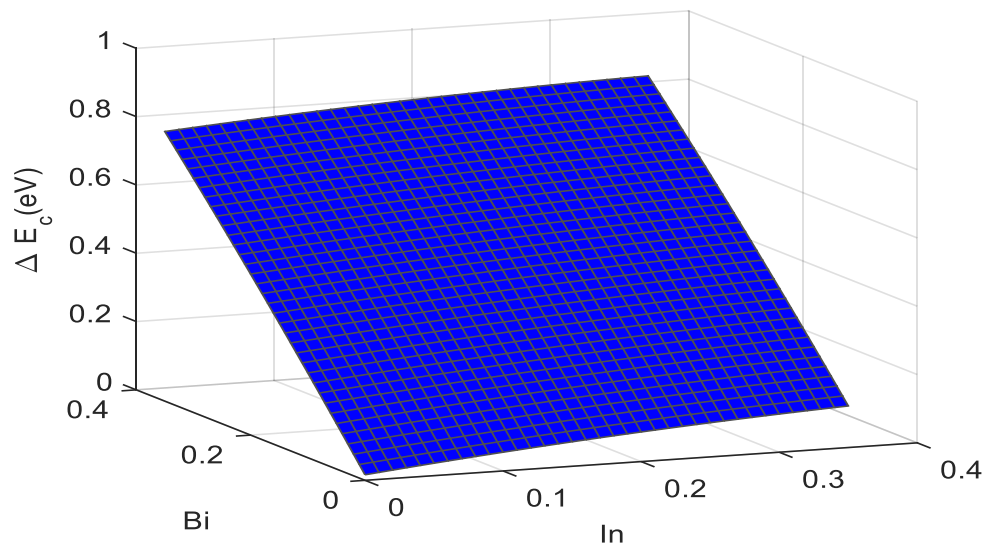


Figure 2.12 : la barrière E_c en fonction de la concentration d'indium et de bismuth.

La figure 2.13 montre l'effet de la contrainte sur la barrière de conduction et on aperçoit que lorsque la concentration de l'indium augmente, l'énergie de la bande de valence diminue. Même résultat pour le bismuth.

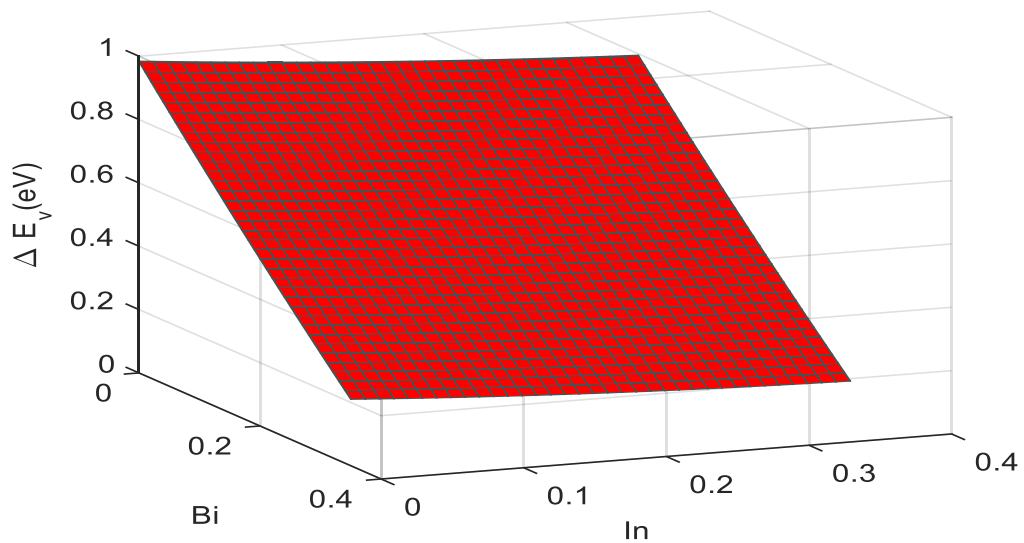


Figure 2.13 : la barrière E_v en fonction de la concentration d'indium et de bismuth.

2.7 Détermination de taux de confinement

La figure 2.14 montre l'indice de confinement en fonction de la concentration de l'indium et du bismuth et on constate que l'augmentation du bismuth a un effet plus important sur Q_c que l'effet de l'indium, alors qu'ils n'ont pas un grand effet sur Q_v . On constate aussi que Q_c vaut 90% et que Q_v est égal 10%. Donc l'électron a plusieurs niveaux de transition et reste confiné dans le puits.

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad \text{II. 1}$$

$$Q_v = 1 - Q_c \quad \text{II. 2}$$

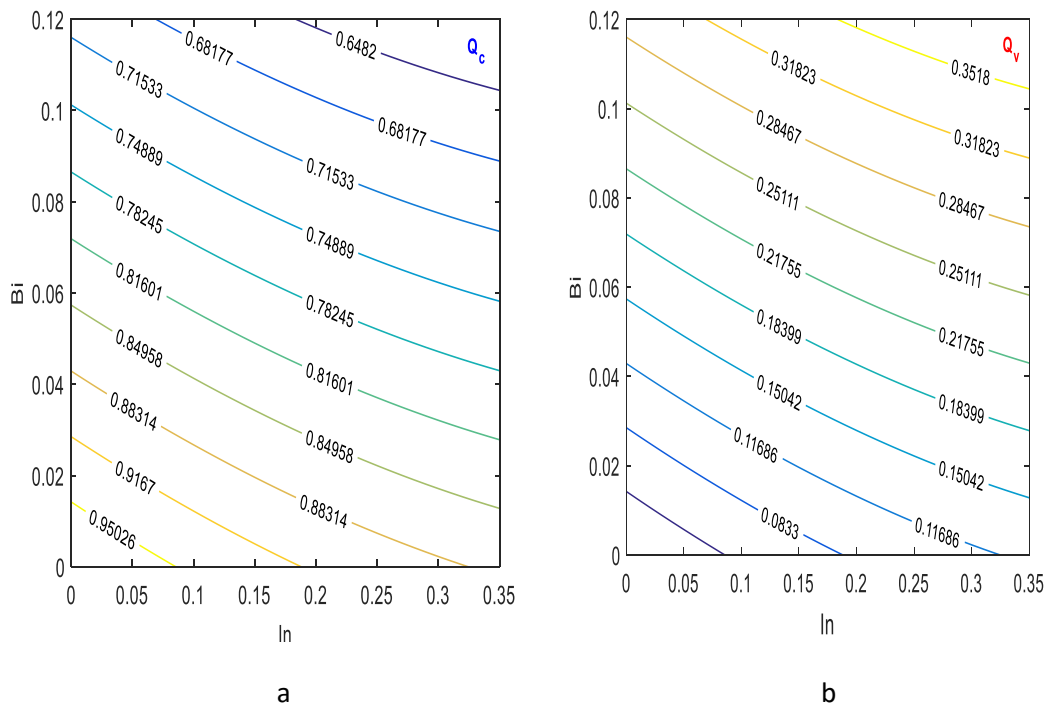


Figure 2.14 (a, b) : Taux de confinement en fonction de l'indium et du bismuth.

2.8 Calcul de l'énergie de quantification

Dans la figure 2.15 on représente l'énergie de quantification des porteurs d'électrons en fonction de la largeur de puits et on remarque, que chaque augmentation dans la concentration de l'indium (x) induit une diminution de l'énergie de quantification. Par exemple si on prend $L=12$ nm on a une énergie de 0.3725 eV et si on varie la composition de l'indium à $x=30\%$ pour $L=18$ nm l'énergie vaut 0.2034 eV et on observe lorsque la largeur de puits augmente, l'énergie de quantification de l'électron diminue.

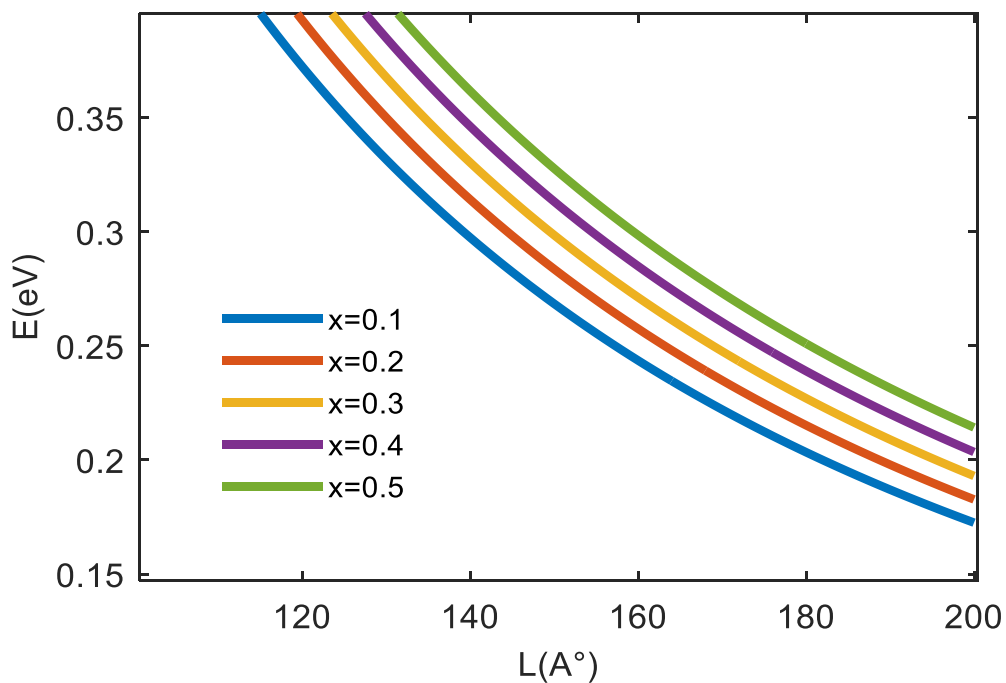


Figure 2.15 : Evolution de l'énergie de quantification des électrons en fonction de la largeur du puits.

La figure 2.16 illustre l'évolution des trous lourds en fonction de la longueur du puits et on note que pour une augmentation de la concentration d'indium l'énergie de trous lourds diminue pour les deux niveaux de quantification, par exemple dans le 1^{er} niveau, pour un couple ($x=10\%$, $L=10$ nm), $E_{hh}=0.09$ eV et pour ($x=30\%$, $L=10$ nm), $E_{hh}=0.088$ eV et pour le 2^{eme} niveau pour un couple ($x=10\%$, $L=10$ nm) $E_{hh}=0.378$ eV et pour un autre couple ($x=30\%$, $L=10$ nm), $E_{hh}=0.371$ eV.

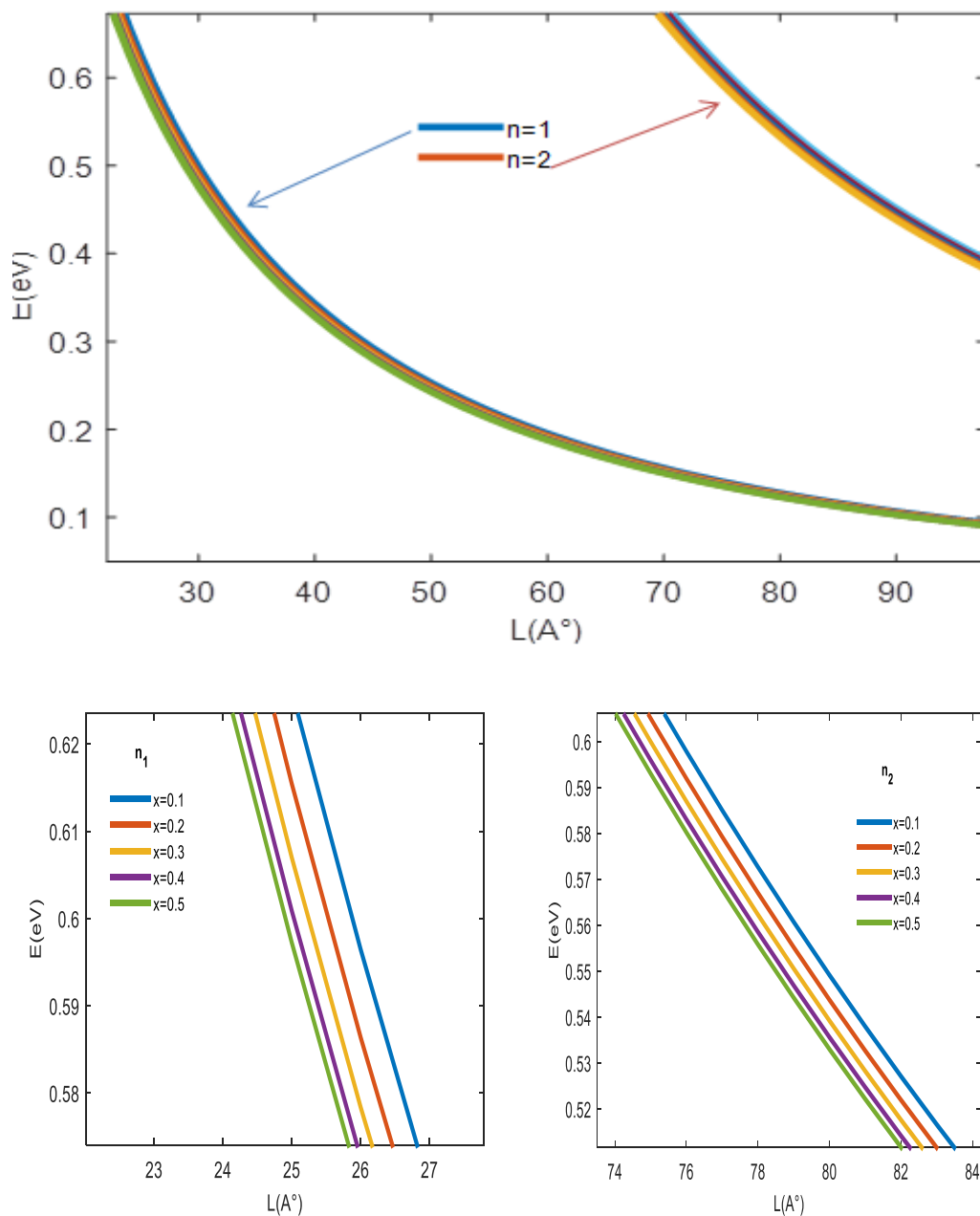


Figure 2.16 : quantification des niveaux de trous lourds dans le puits en fonction de la largeur de puits.

La figure 2.17 montre le niveau des trous lourds dans les trois niveaux en fonction de la longueur de puits et on peut observer que l'énergie du 1er niveau est plus importante que les 2 autres niveaux. Pour $x=10\%$ et $L=20$ nm, on a $E_{(hh_n1)}=0.02816$ eV, $E_{(hh_n2)}=0.1138$ eV et $E_{(hh_n3)}=0.2599$ eV.

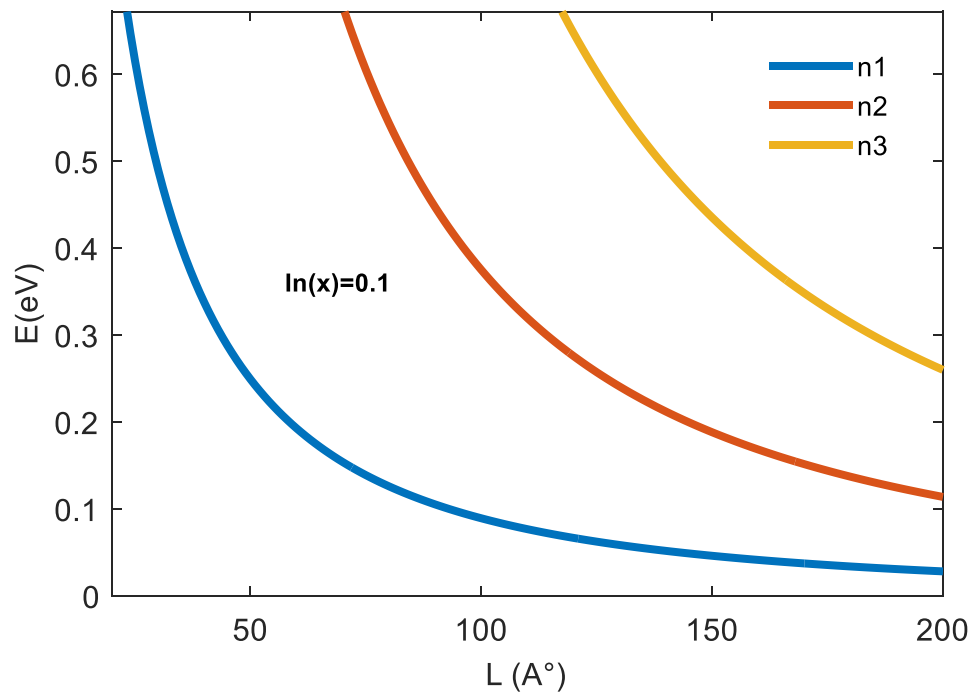


Figure 2.17 : l'évolution de l'énergie de quantification en fonction d'une concentrations fixe de l'indium et de la largeur du puits pour les 3 niveau.

2.9 Energie de transition

La figure 2.18 représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et de la largeur du puits. On observe que lorsque $x=10\%$ et $y=2\%$, l'énergie de transition pour le niveau 1 vaut $E_{tr}=0.76$ eV pour une longueur de puits de $L=20$ nm. Si on augmente le Bi à 4%, 6% et 10%, on constate pour le niveau 1, ainsi que pour les niveaux 2 et 3, une diminution de l'énergie de transition. En calculant la différence entre les valeurs de l'énergie de transition on déduit que la différence croît avec l'augmentation de bismuth.

$$\Delta 1 = E_{tr1} - E_{tr2} = 0.76 - 0.73 = 0.03eV, \Delta 2 = E_{tr1} - E_{tr3} = 0.76 - 0.70 = 0.06eV, \Delta 3 = E_{tr1} - E_{tr4} = 0.76 - 0.62 = 0.14eV.$$

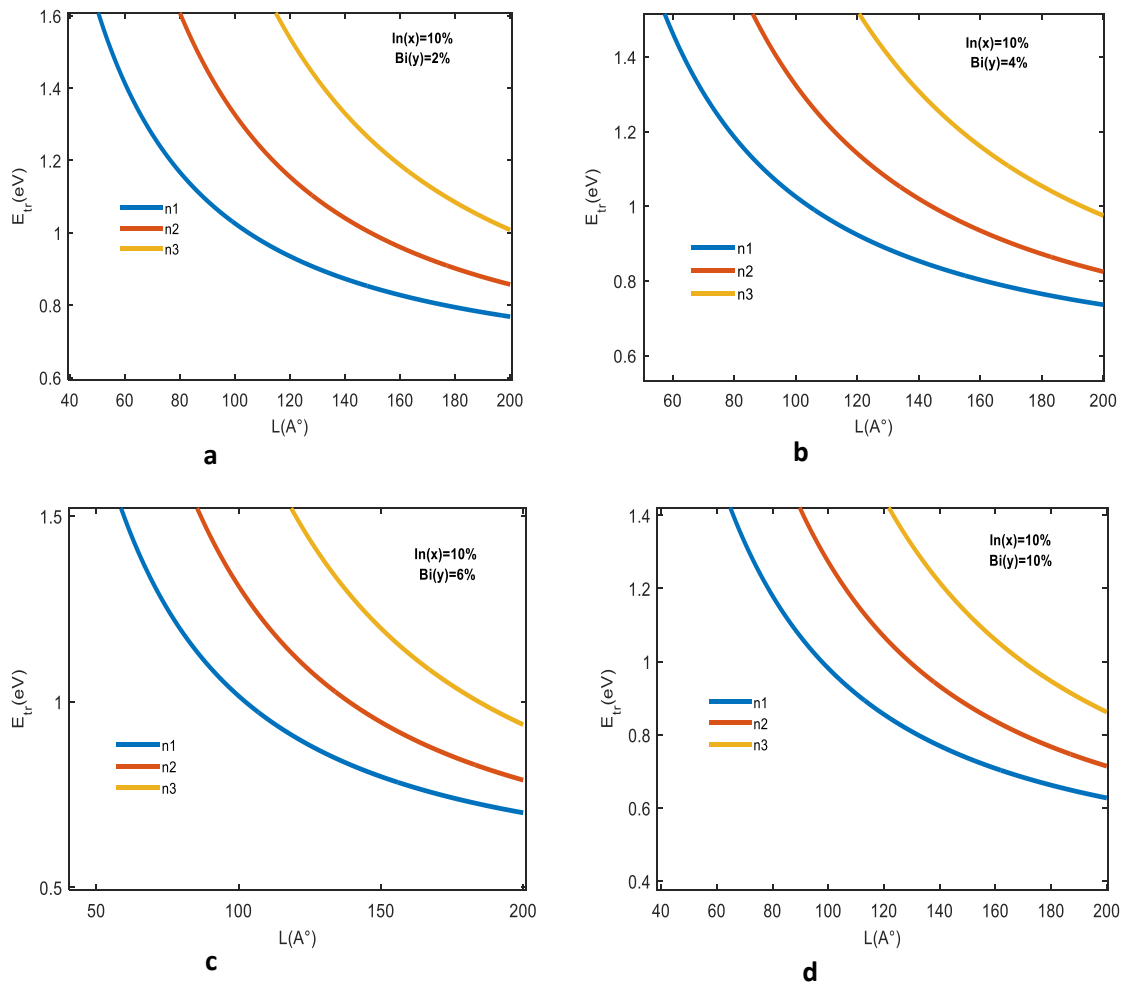


Figure 2.18 (a, b, c et d) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différents variations de bismuth et $In(x)=10\%$.

La figure 2.19 montre l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et de la largeur du puits. On note que lorsque $x=20\%$ et $y=2\%$, l'énergie de transition pour le niveau 1 vaut $E_{tr}=0.73$ eV pour une largeur de puits de $L=20$ nm. Si on augmente le Bi à 4%, 6% et 10%, on constate pour le niveau 1, ainsi que pour les niveaux 2 et 3, une diminution de l'énergie de transition.

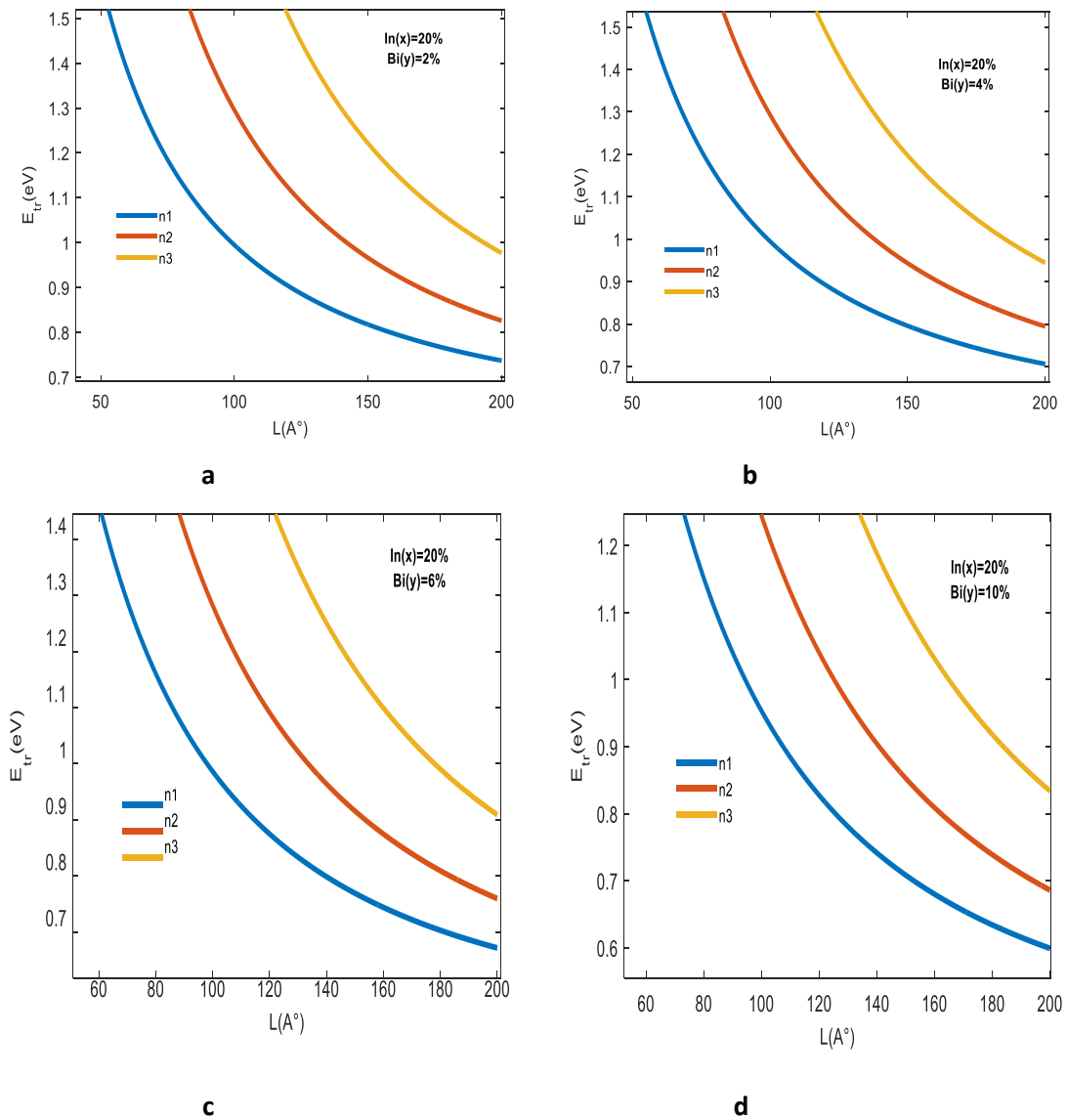


Figure 2.19 (a, b, c et d) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différentes variations de bismuth et $In(x)=20\%$.

La figure 2.20 Représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et de la largeur du puits. On remarque que lorsque $x=30\%$ et $y=2\%$, l'énergie de transition pour le niveau 1 vaut $E_{tr}=0.71$ eV pour une largeur de puits de $L=20$ nm. Si on augmente le Bi à 4%, 6% et 10%, on constate pour le niveau 1, ainsi que pour les niveaux 2 et 3, une diminution de l'énergie de transition.

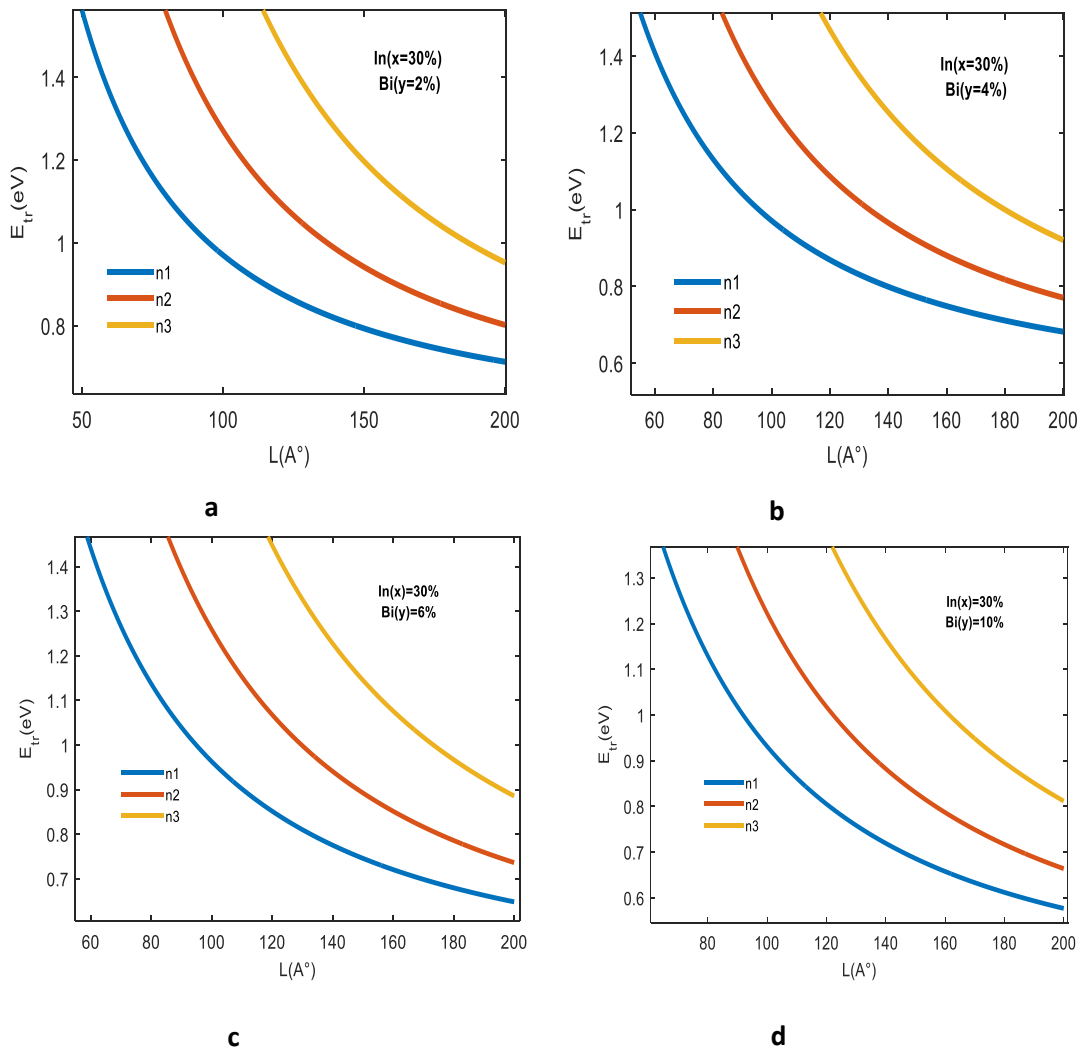


Figure 2.20 (a, b, c et d) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différentes variations de bismuth et $In(x)=30\%$.

La figure 2.21 illustre l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et de la largeur du puits. On fixe la concentration de bismuth à $y=2\%$ et on varie la concentration de l'indium entre $x=10\%$, 20% et 30% et on remarque que l'énergie de transition diminue. On prend un exemple : pour $x=10\%$, et $L=20\text{ nm}$, l'énergie vaut $E_{tr}=0.7683\text{ eV}$ et pour $x=20\%$, $E_{tr}=0.7371\text{ eV}$ et pour $x=30\%$, $E_{tr}=0.7127\text{ eV}$. On constate que l'augmentation de l'indium diminue l'énergie de transition.

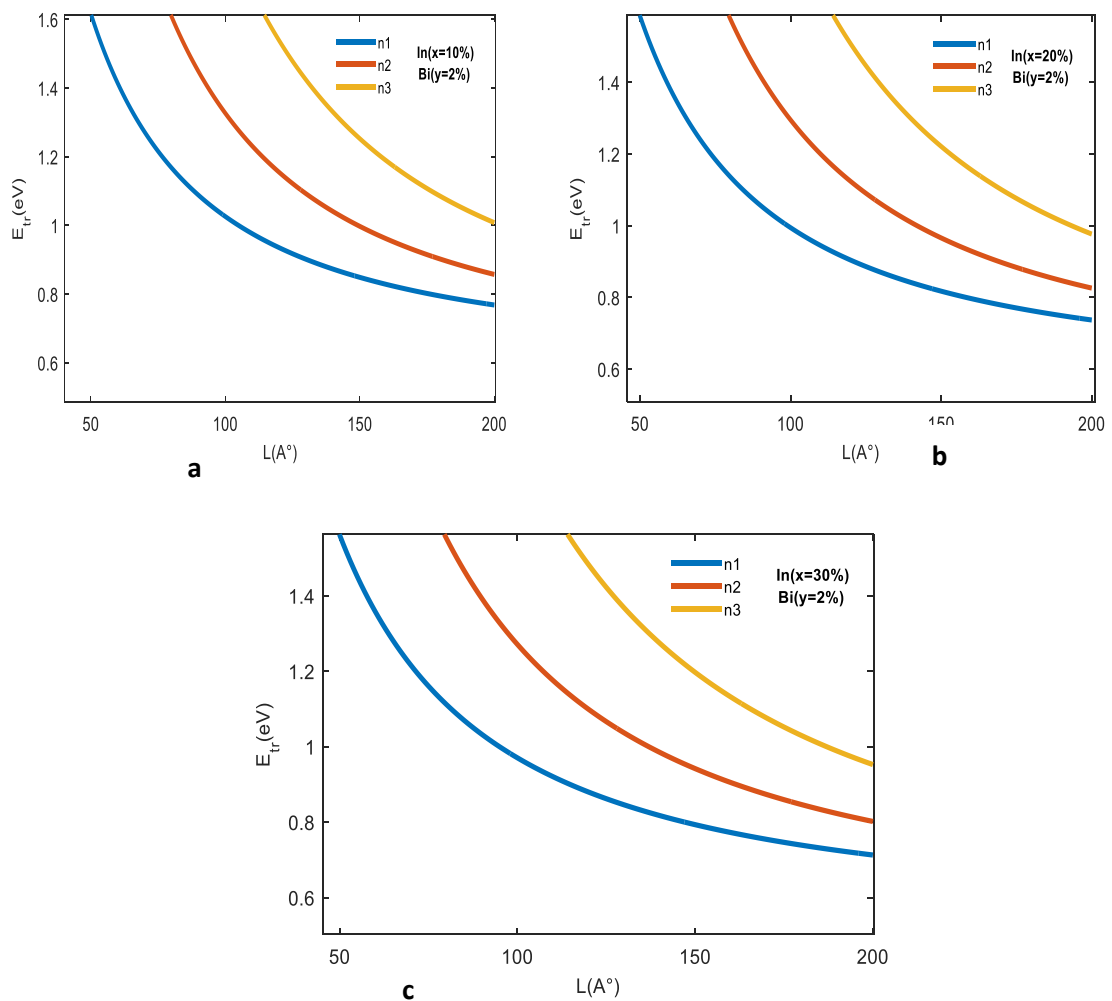


Figure 2.21 (a, b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations l'indium et $Bi(y)=2\%$.

La figure 2.22 montre l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium et du bismuth. On observe que lorsqu'on fixe le bismuth à ($y=4\%$) et qu'on varie l'indium entre ($x=10\%$, $x=20\%$ et $x=30\%$) l'énergie de transition diminue. Pour $x=10\%$, et $L=20\text{ nm}$ l'énergie de transition vaut $E_{tr}=0.7362\text{ eV}$, pour $x=20\%$, l'énergie de transition est égale à $E_{tr}=0.7057\text{ eV}$ et pour $x=30\%$, $E_{tr}=0.682\text{ eV}$. On remarque que la diminution de l'énergie de transition croit de plus en plus avec l'augmentation de l'indium et du bismuth.

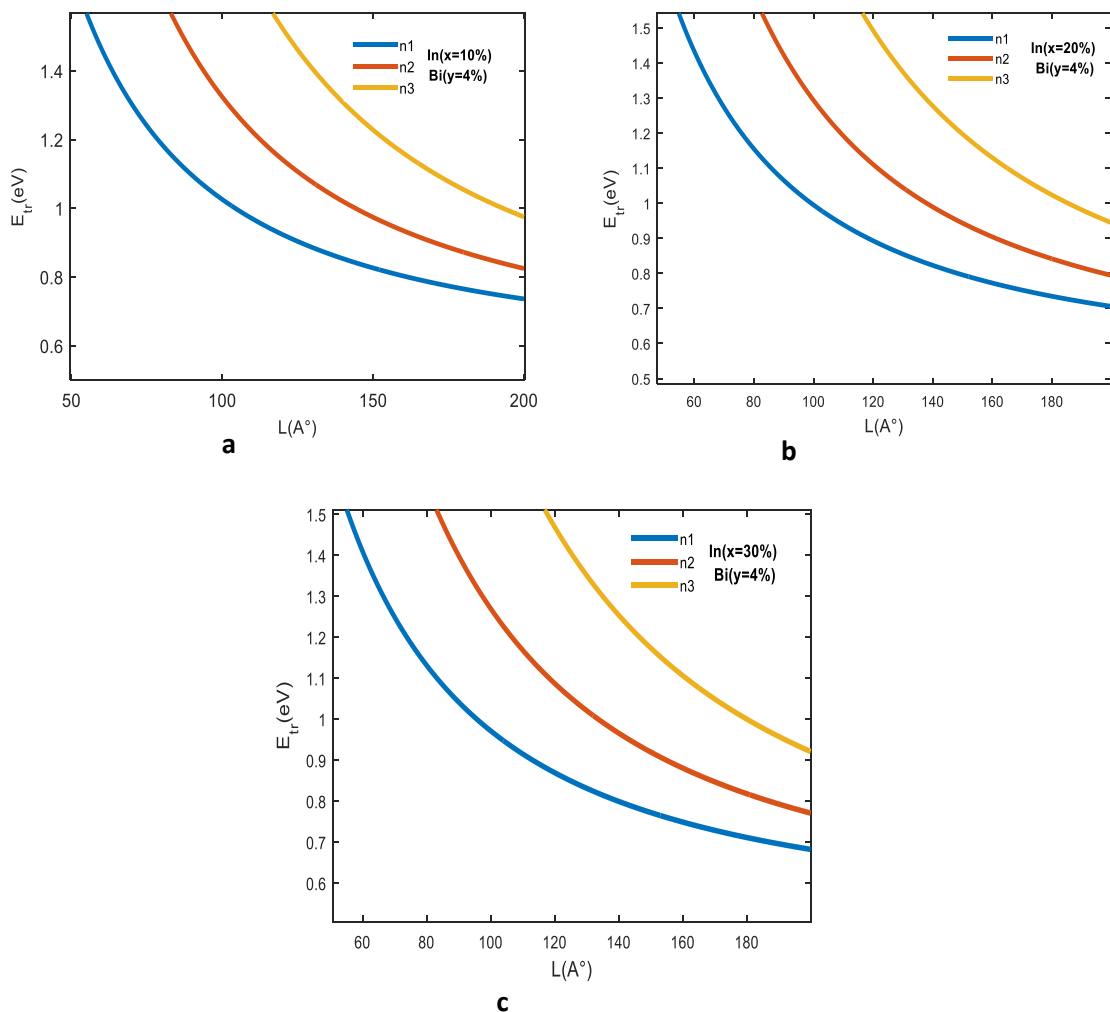


Figure 2.22 (a, b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations l'indium et $\text{Bi}(y)=4\%$.

La figure 2.23 représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration d'indium et de bismuth. On remarque que lorsque on fixe le bismuth a ($y=2\%$) et qu'on varie l'indium entre ($x=10\%$ 20% et 30%) l'énergie de transition diminue,. Pour le couple ($x=10\%$ et $L=20$ nm) l'énergie vaut $E_{tr}=0.7012$ eV , ($x=20\%$ $L=20$ nm) $E_{tr}= 0.6714$ eV et pour ($x=30\%$ et $L=20$ nm) $E_{tr}= 0.6483$ eV et on constate que l'effet de l'indium ici est plus important que l'effet de l'augmentation de bismuth.

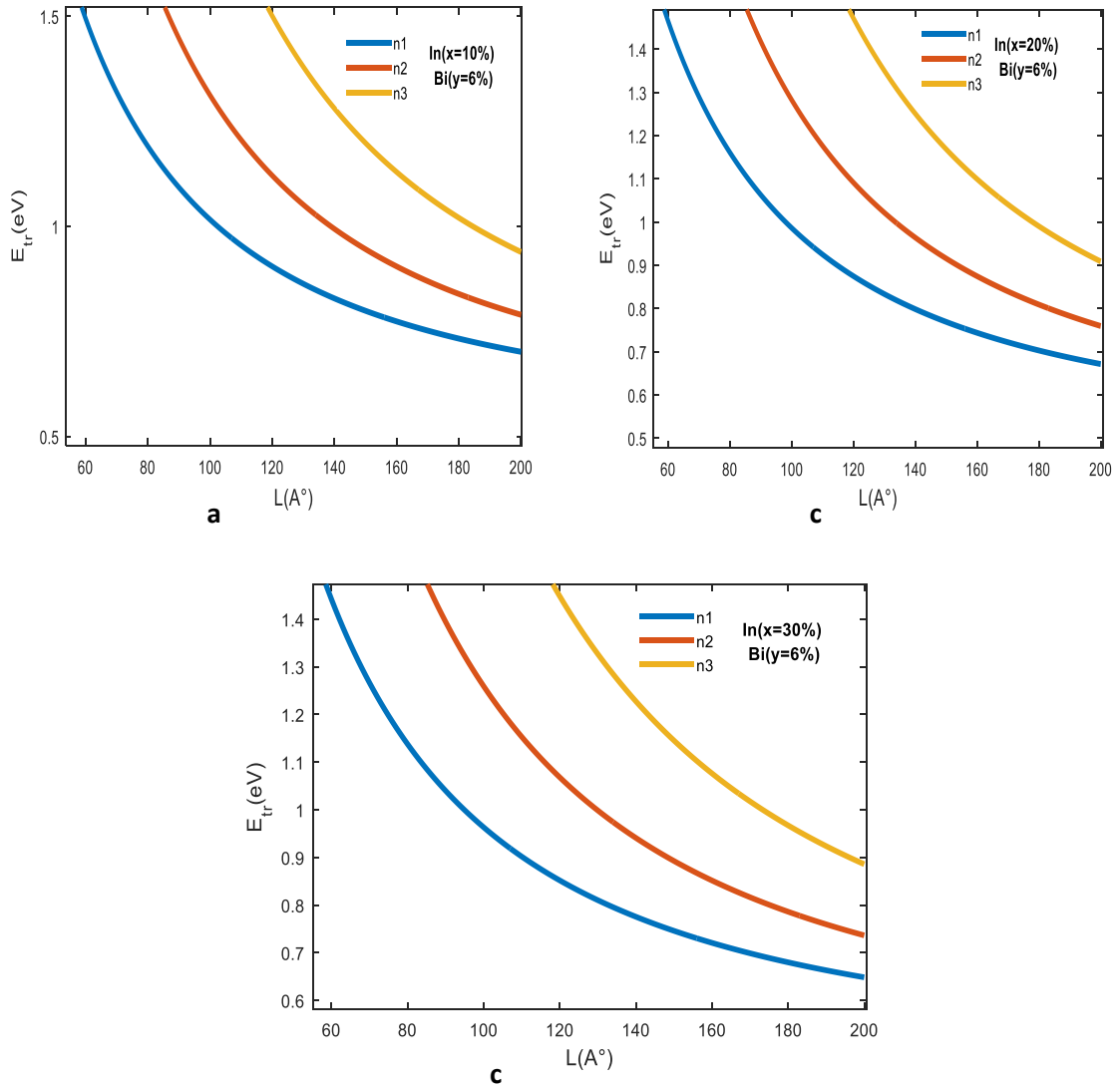


Figure 2.23 (a, b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations d'indium et $Bi(y)=6\%$.

La figure 2.24 Représente l'évolution de l'énergie de transition en fonction de la concentration l'indium et du bismuth et on note que lorsqu'on fixe le bismuth à ($y=10\%$) et qu'on varie l'indium entre ($x=10\%$ 20% et 30%) on remarque que l'énergie de transition diminue pour toute augmentation de la concentration de l'indium, du bismuth et de la largeur de puits.

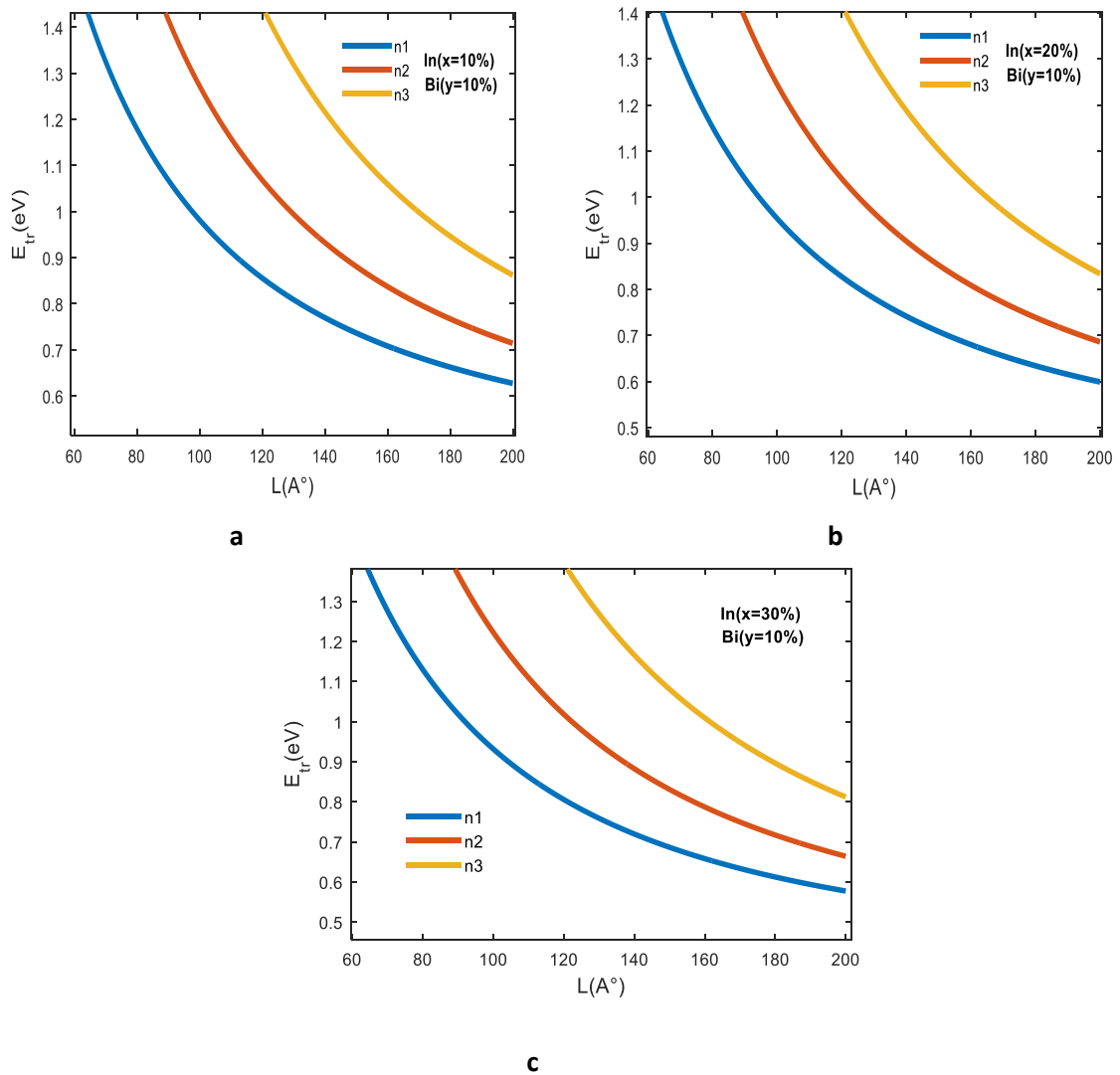


Figure 2.24 (a b et c) : variations de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et $Bi(y)=10\%$.

2.10 Calcul de La longueur d'onde

$$\lambda = \frac{1.24}{E_{tr}}$$

II.3

La figure 2.25 illustre l'évolution de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'indium, bismuth et de la longueur de puits. On voit que si on fixe x à x=10% et la longueur du puits L à L=20 nm et qu'on varie la concentration de bismuth à y=2%, λ_{n1} est égal à 1.614 μm . Pour y=4%, $\lambda_{n1}= 1.684 \mu\text{m}$, pour y=6%, $\lambda_{n1}= 1.768 \mu\text{m}$ et pour y=10%, $\lambda_{n1}= 1.976 \mu\text{m}$.

$$\Delta_1 = \lambda_2 - \lambda_1 = 1.684 - 1.614 = 0.07\mu\text{m}, \Delta_2 = \lambda_3 - \lambda_1 = 1.768 - 1.614 = 0.154\mu\text{m}, \Delta_3 = \lambda_4 - \lambda_1 = 1.976 - 1.614 = 0.362\mu\text{m}.$$

On voit l'accroissement de la longueur d'onde avec l'augmentation de bismuth.

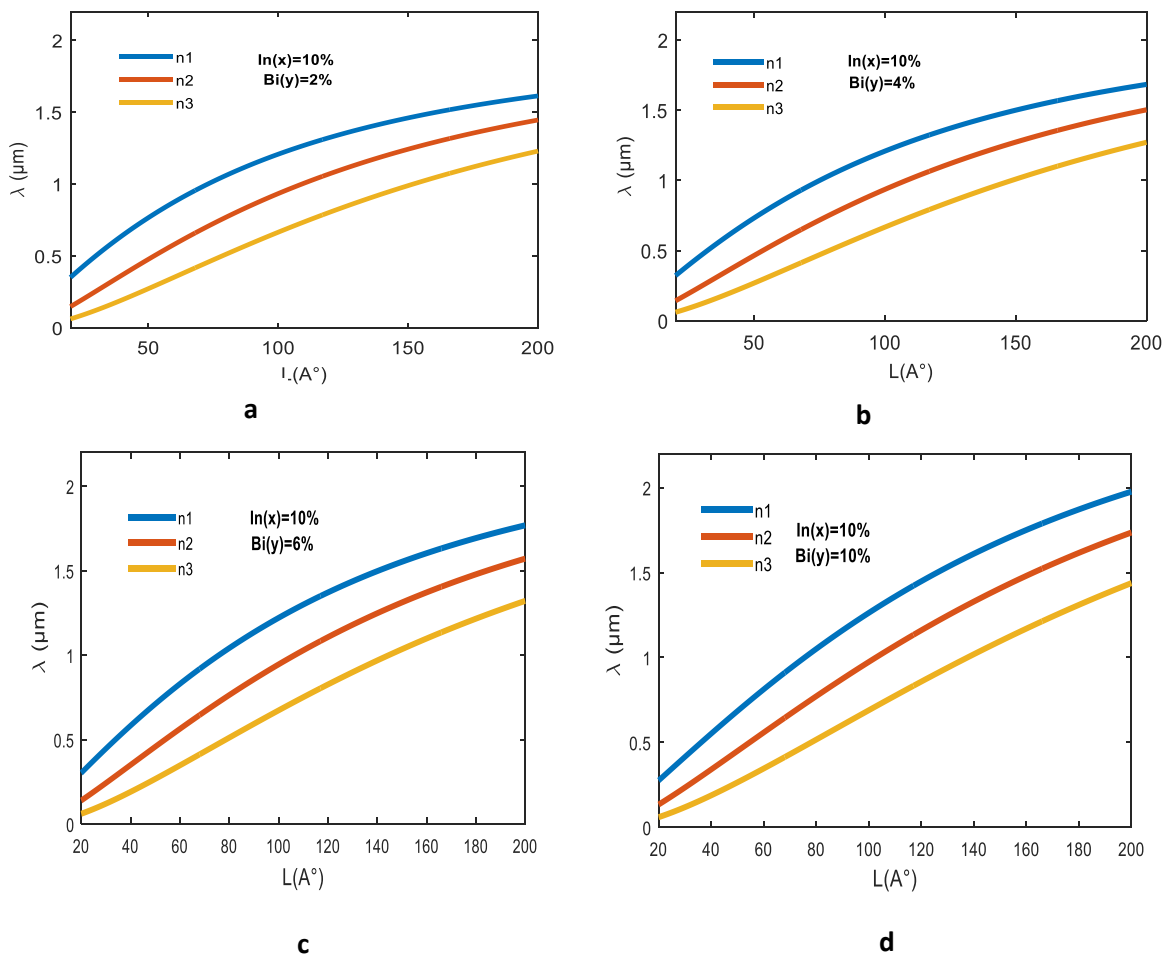


Figure 2.25 (a, b, c et d) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs de bismuth et $\text{In}(x)=10\%$.

La figure 2.26 montre l'évolution de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et de la longueur du puits. On voit que si on fixe $x=20\%$ et la longueur du puits à $L=20$ nm et qu'on fait varier la concentration de bismuth à $y=2\%$, la longueur d'onde sera égale à $\lambda_{n1}= 1.682\mu\text{m}$. Pour $y=4\%$, $\lambda_{n1}= 1.757 \mu\text{m}$; pour $y=6\%$, $\lambda_{n1}=1.847\mu\text{m}$; pour $y=10\%$, $\lambda_{n1}= 2.07\mu\text{m}$. On constate que si la concentration du bismuth croît, la longueur d'onde croît aussi.

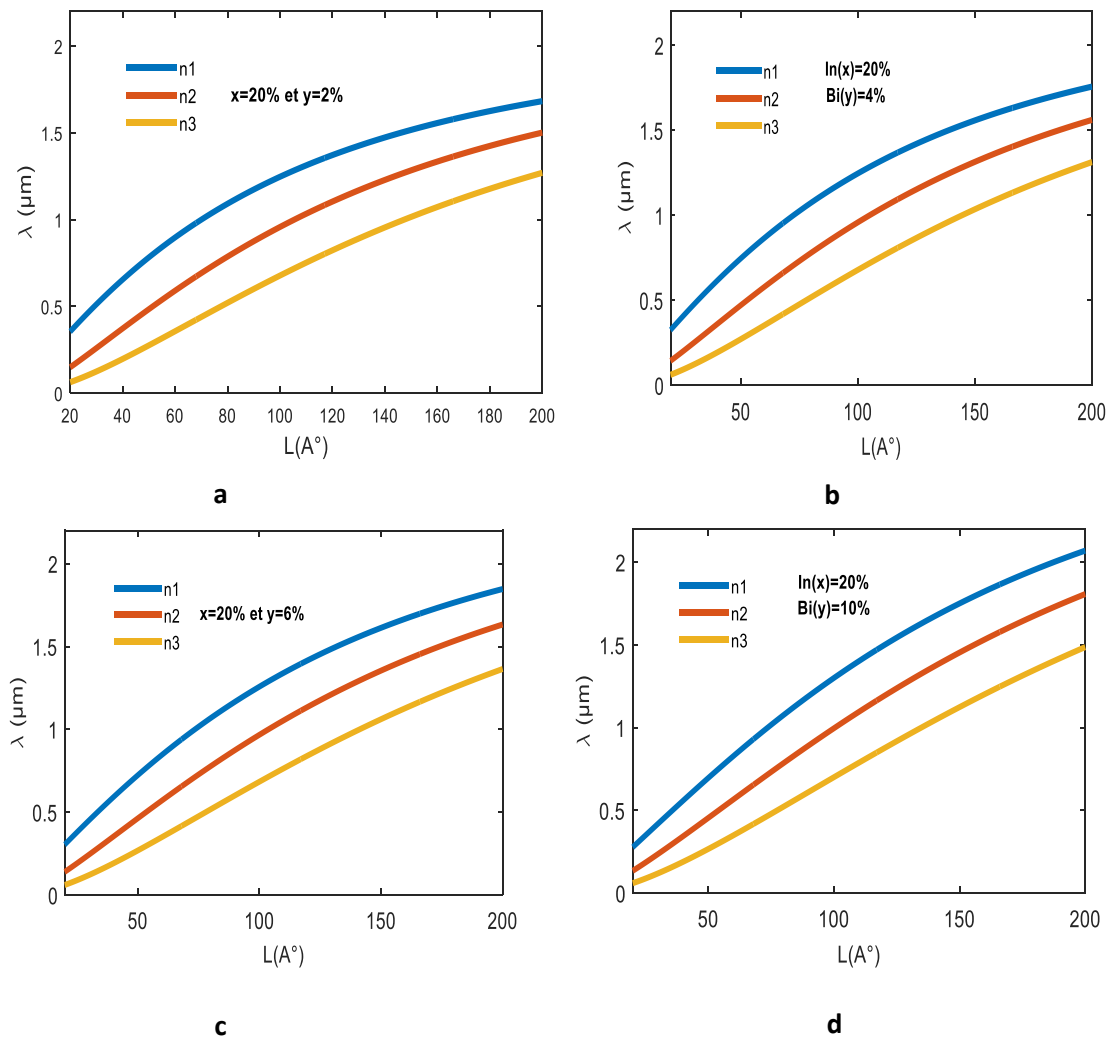


Figure 2.26 (a, b, c et d) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et bismuth $x=20\%$.

La figure 2.27 Représente l'évolution de la longueur d'onde en fonction de la concentration d'indium, du bismuth et de la largeur du puits. On voit que lorsque qu'on fixe $x=30\%$ et la largeur du puits à $L=20$ nm et qu'on fait varier la concentration de bismuth à $y=2\%$, la longueur d'onde est égale à $\lambda_{n1}=1.74\mu\text{m}$. Pour $y=4\%$, la longueur d'onde est $\lambda_{n1}=1.818\mu\text{m}$; pour $y=6\%$, $\lambda_{n1}=1.913\mu\text{m}$; pour $y=10\%$, $\lambda_{n1}=2.149\mu\text{m}$. On remarque que la longueur d'onde avec une concentration d'indium élevée devient plus importante pour des concentrations de bismuth plus faibles.

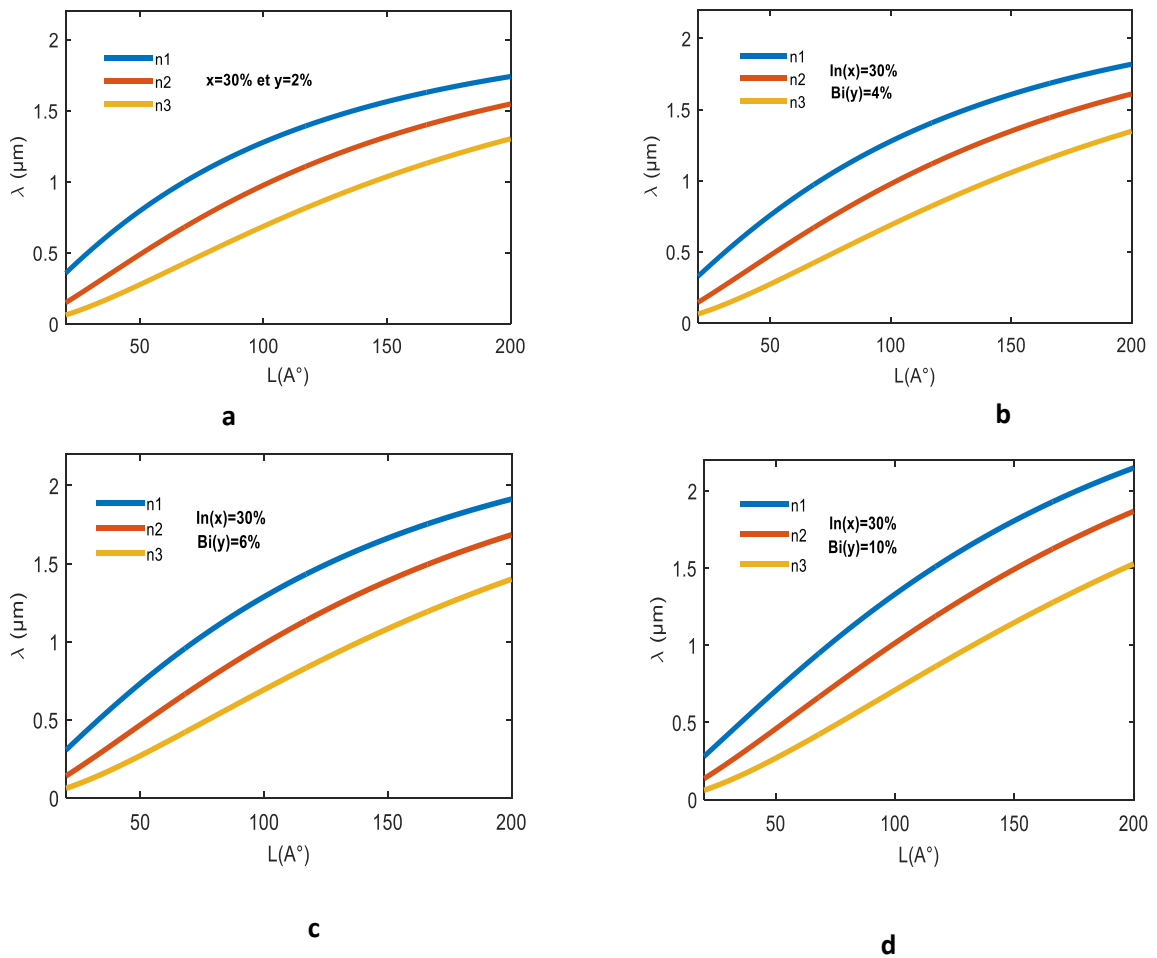


Figure 2.27 (a, b, c et d) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et bismuth $x=30\%$.

La figure 2.28 montre la variation de la longueur d'onde en fonction de la concentration de l'indium, du bismuth et de la largeur du puits. Si on fixe $y=2\%$, pour $x=10\%$, la longueur d'onde est égale $\lambda_{n1}= 1.614 \mu\text{m}$; pour $x=20\%$, la longueur d'onde est $\lambda_{n1}= 1.682 \mu\text{m}$; pour $x=30\%$, $\lambda_{n1}= 1.74 \mu\text{m}$. On voit que la longueur d'onde augmente avec l'augmentation de la concentration de l'indium

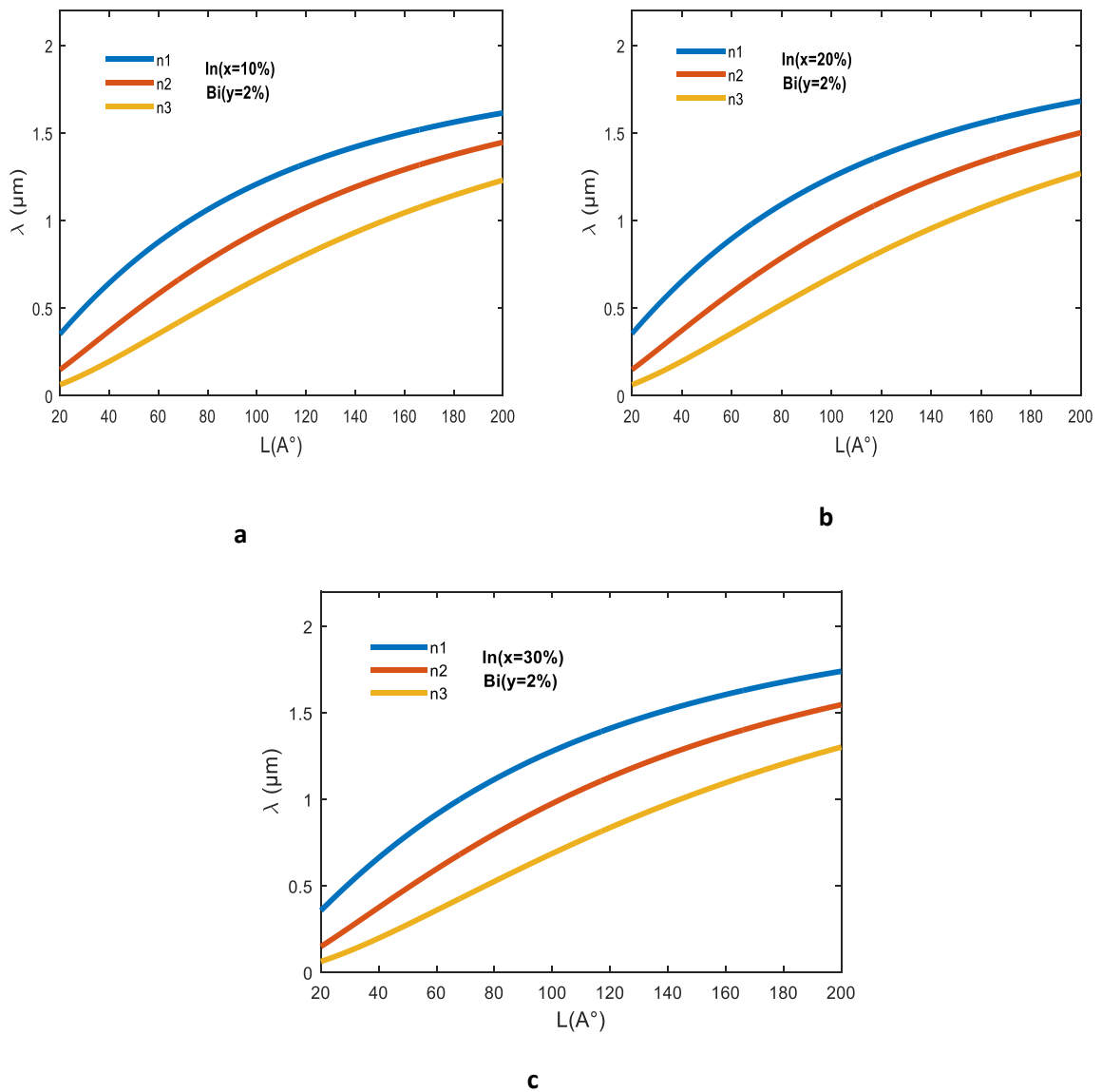


Figure 2.28 (a, b et c) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et bismuth $y=2\%$.

La figure 2.29 met en relief la longueur d'onde en fonction de la concentration de l'indium, du bismuth et de la largeur du puits. Si on fixe la concentration du Bismuth à $y=4\%$, pour une concentration d'indium $x=10\%$, la longueur d'onde est égale $\lambda_{n1}=1.684 \mu\text{m}$; pour $x=20\%$, la longueur d'onde vaut $\lambda_{n1}=1.757 \mu\text{m}$; pour $x=30\%$, $\lambda_{n1}=1.818 \mu\text{m}$. On observe que la longueur d'onde augmente avec l'augmentation de la concentration de l'indium.

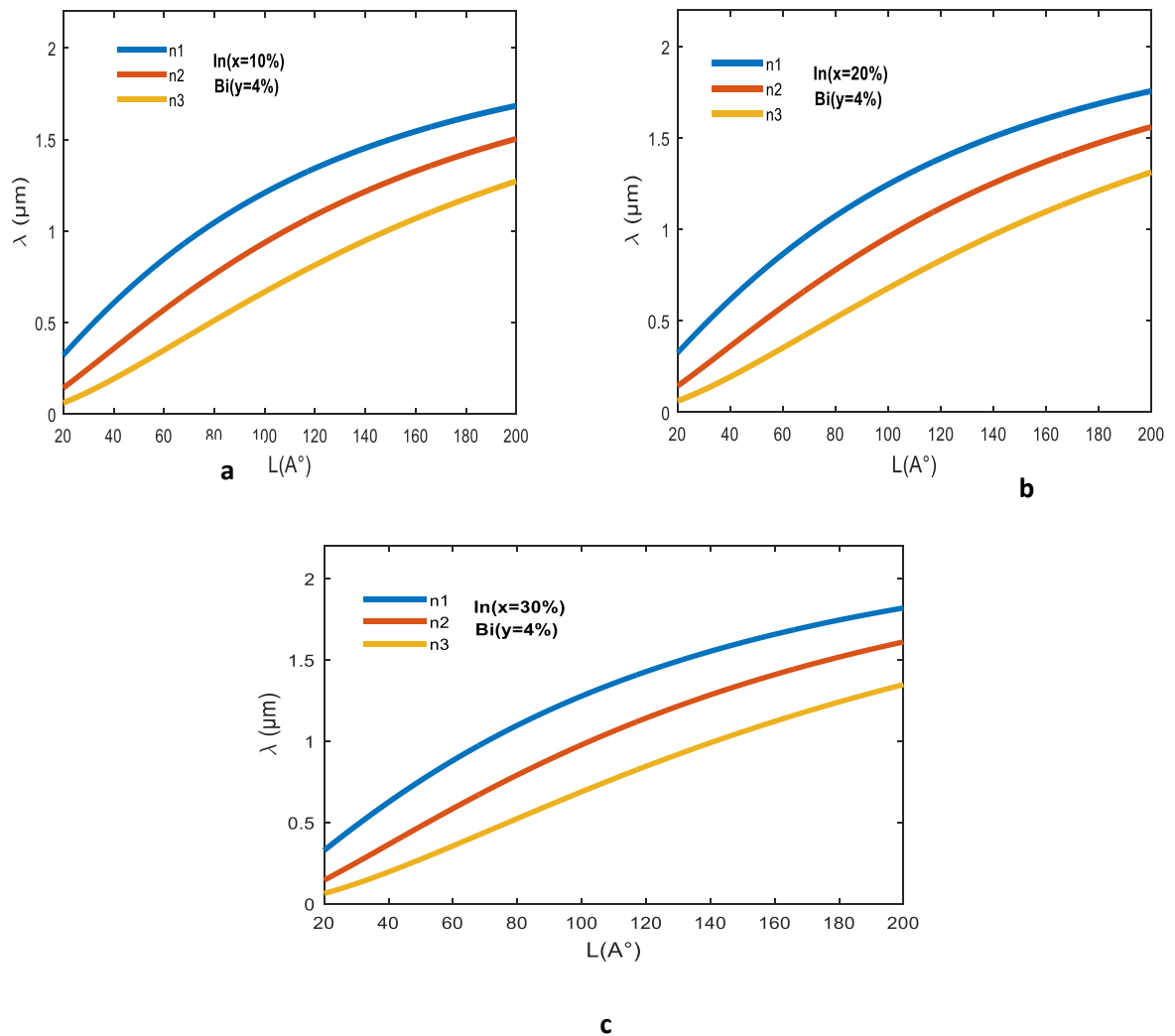


Figure 2.29 (a, b et c) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et bismuth $y=4\%$.

La figure 2.30 Représente la longueur d'onde en fonction de la concentration de l'indium, de la concentration du bismuth et de la largeur du puits. Si on fixe $y=6\%$, pour $x=10\%$ la longueur d'onde vaut $\lambda_{n1}= 1.768 \mu\text{m}$; pour $x=20\%$, elle est de $\lambda_{n1}= 1.847 \mu\text{m}$; pour $x=30\%$, $\lambda_{n1}= 1.913 \mu\text{m}$. On note que la longueur d'onde croît avec l'augmentation de la concentration de l'indium.

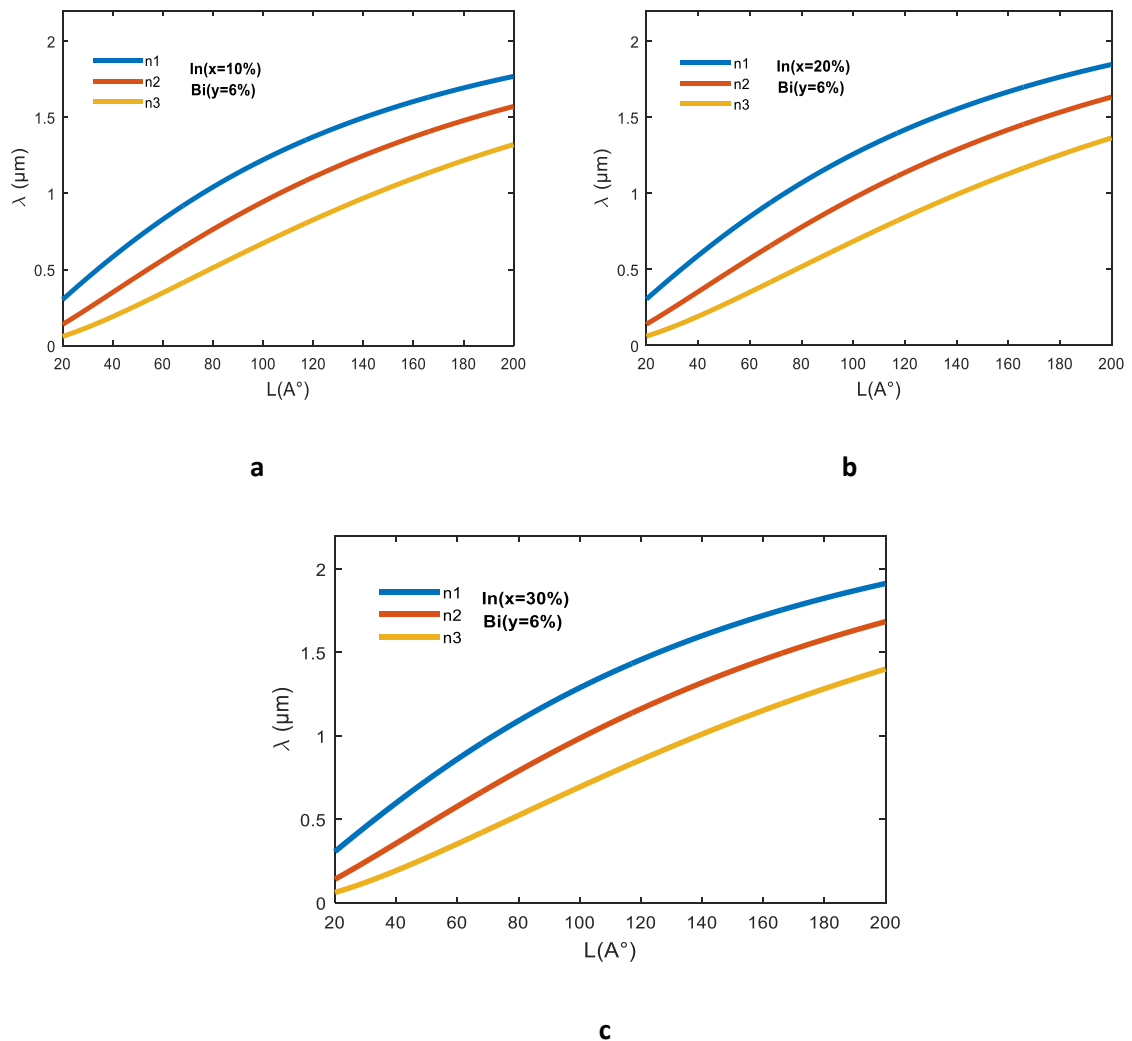


Figure 2.30 (a, b et c) : variations de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et du bismuth $y=6\%$.

La figure 2.31 Représente la longueur d'onde en fonction de la concentration de l'indium, de la concentration du bismuth et de la largeur du puits. Si on fixe la concentration du Bismuth à $y=10\%$, pour une concentration d'Indium $x=10\%$, on a une longueur d'onde $\lambda_{n1}= 1.976 \mu\text{m}$; pour $x=20\%$, $\lambda_{n1}= 2.07 \mu\text{m}$; pour $x=30\%$, $\lambda_{n1}= 2.149 \mu\text{m}$. On remarque là aussi que la longueur d'onde croît avec l'augmentation de la concentration de l'indium et du bismuth.

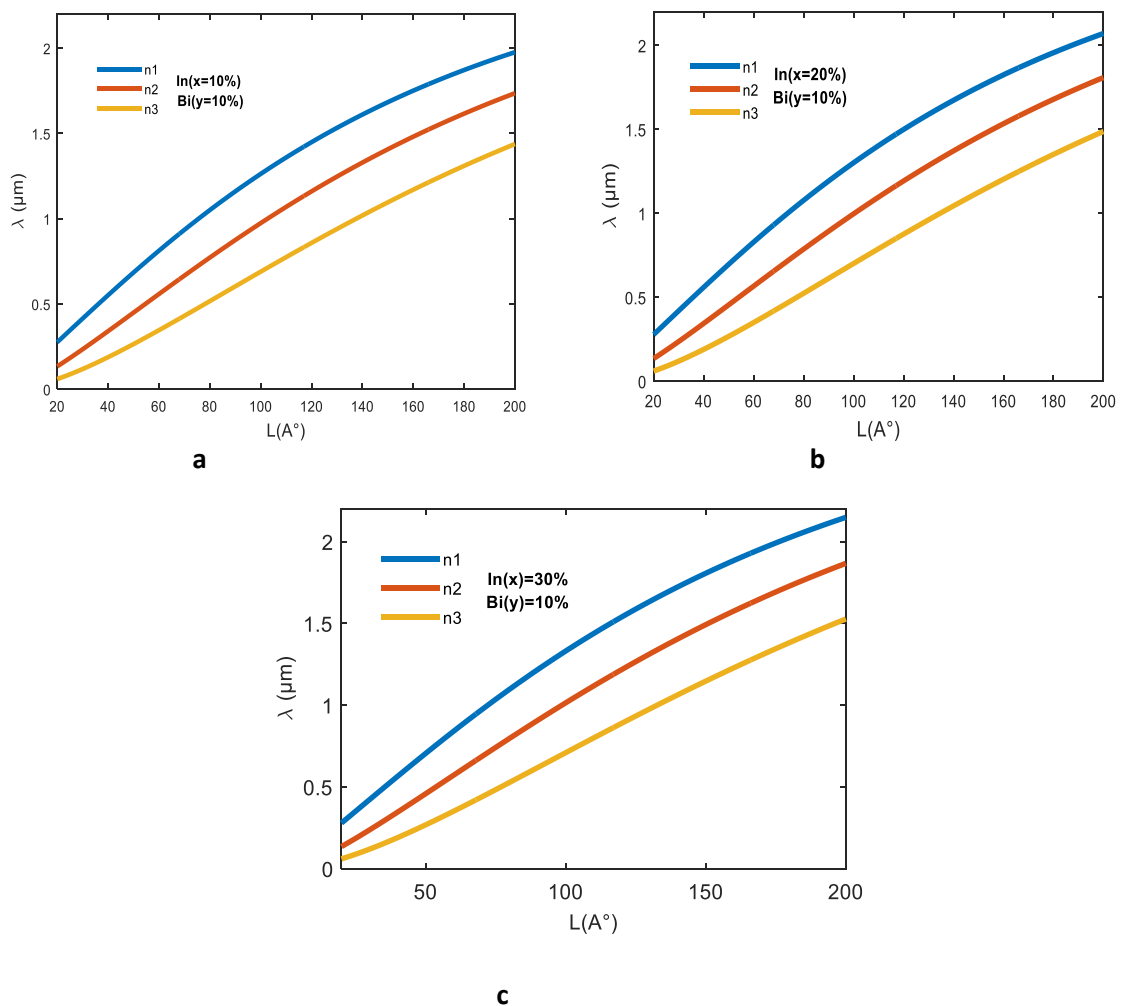


Figure 2.31 (a, b et c) : evolution de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et du bismuth $y=10\%$.

La figure 2.32 Représente la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits, de la concentration de l'indium et du bismuth pour le premier niveau. Si on fixe les valeurs de la concentration du Bismuth entre $y=2\%$ et $y=10\%$ et que respectivement pour chaque valeur de y , on fait varier la concentration de l'indium entre $x=10\%$, $x=20\%$, $x=30\%$, on observe que lorsqu'on arrive à une largeur du puits de $L=60\text{ nm}$, les 3 longueurs d'onde s'écartent. Par exemple pour $(x=30\% y=2\%)$, la longueur d'onde est égale à $\lambda_{n1}=1.74\mu\text{m}$; pour $(x=30\% y=10\%)$, $\lambda_{n1}=2.149\mu\text{m}$. On remarque aussi que la concentration du bismuth influe sur la longueur d'onde.

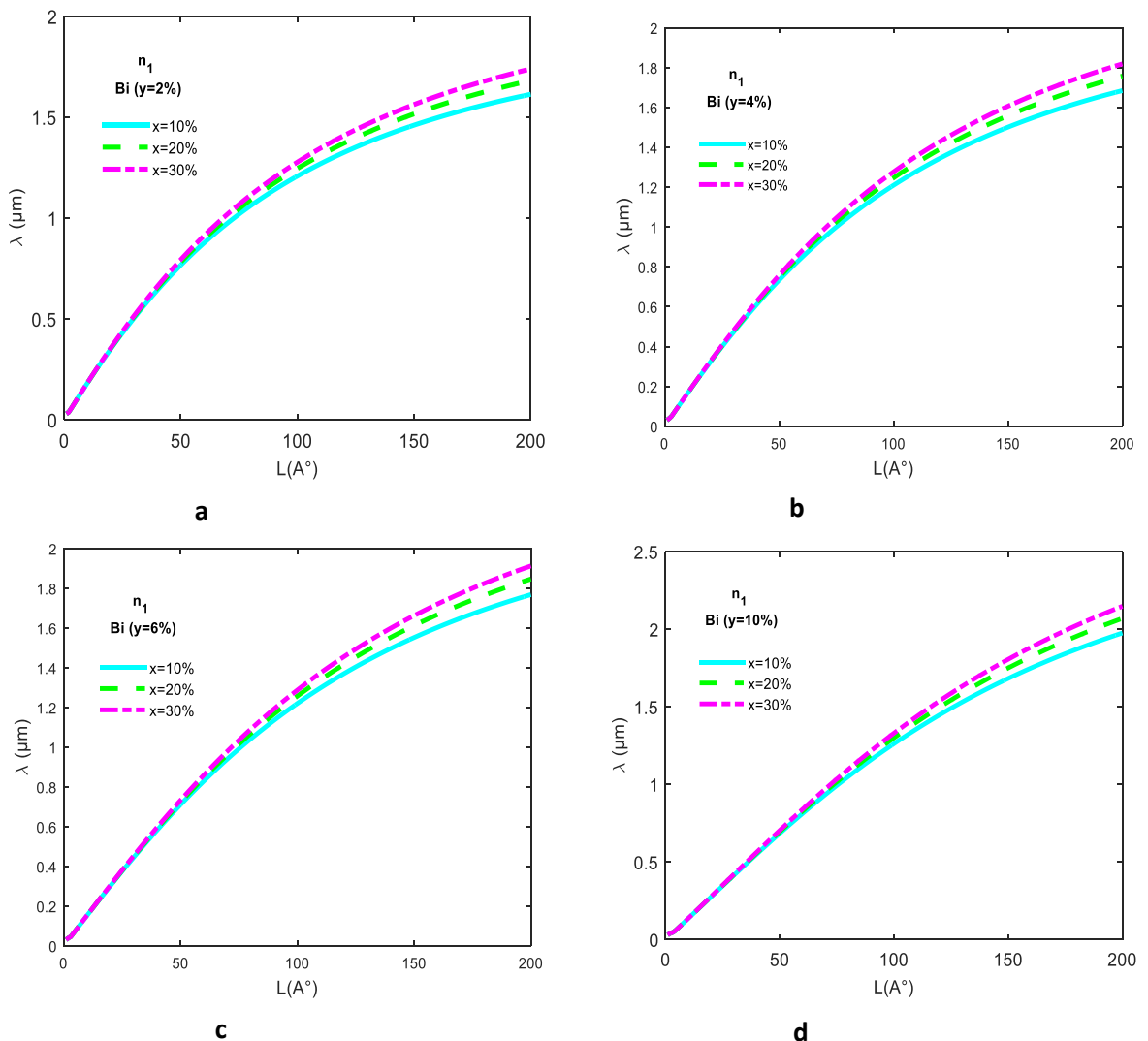


Figure 2.32 (a, b c et d) : croissance de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits pour différentes concentrations de l'indium et du bismuth dans le 1 niveau.

La figure 2.33 Représente la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits, de la concentration de l'indium et du bismuth pour le deuxième niveau. Si on fixe les valeurs de la concentration de l'Indium entre $x=10\%$, $x=20\%$, $x=30\%$ et que respectivement pour chaque valeur de x , on fait varier la concentration du Bismuth entre $y=2\%$, et $y=10\%$, on observe que lorsque la concentration du Bismuth augmente, la largeur du puits augmente aussi. On note aussi qu'à partir d' $y=4\%$, les longueurs d'onde des deux concentrations $x=10\%$ et $x=20\%$ croissent plus rapidement que la troisième concentration $x=30\%$. Pour le reste des concentrations on remarque que la longueur d'onde croit.

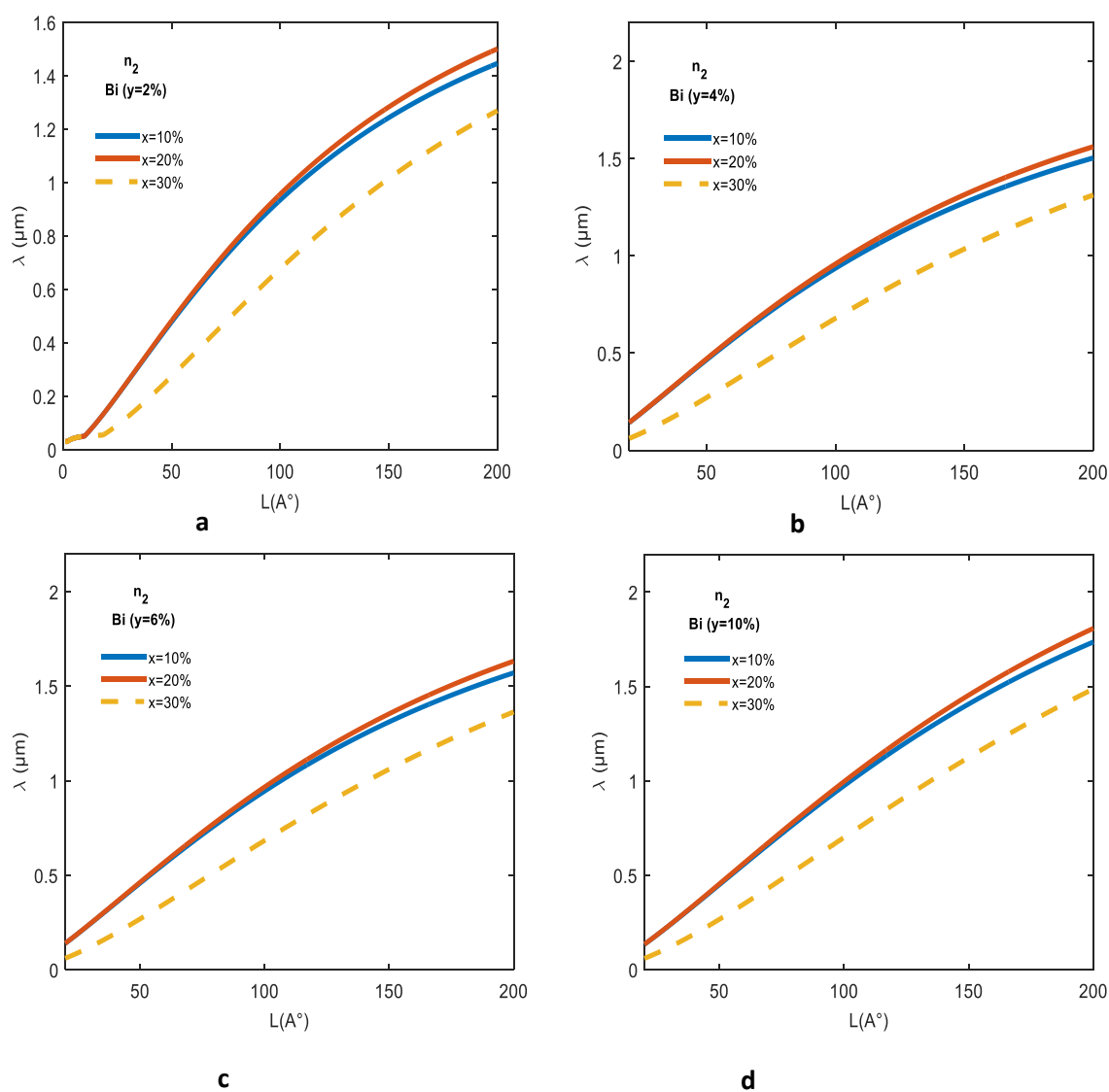


Figure 2.33 (a b c et d) : Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits et des concentrations de l'indium et du bismuth dans le niveau $n=2$.

Conclusion générale

Le travail effectué dans le cadre de ce projet de fin d'études porte sur l'étude et la simulation d'une structure à base de $In_xGa_{1-x}Sb_{1-y}Bi_y/In_zGa_{1-z}Sb$ pour une émission laser, à partir des différentes relations théoriques et des simulations faites sous logiciel MATLAB.

Pour cela nous avons commencé par présenter dans le premier chapitre quelques généralités sur les semi-conducteurs III-V, ainsi que les principales notions théoriques fondamentales nécessaires à la compréhension des structures à puits quantiques. Ensuite, nous avons abordé l'étude du matériau quaternaire $GaInSbBi$ et l'influence des concentrations d'indium et du bismuth sur les différents paramètres physiques, électroniques du dit de matériau.

Dans le deuxième chapitre nous avons vu l'influence de l'incorporation de l'indium et du bismuth qui ont pour effet de diminuer le gap et nous avons effectué la simulation des différents paramètres qui concernent le puits quantique à base de $GaInSb / GaInSbBi / GaInSb$, tels que les masses effectives, l'énergie de quantification, de transition et longueur d'onde d'émission.

A la fin de notre étude on a fini par trouver que la meilleure concentration de l'indium est de 10% alors que la concentration du bismuth variera en fonction des résultats voulus.

D'après le calcul du taux de confinement on a trouvé que le Q_c vaut 90% et que le Q_v est égal à 10%. Ensuite on a constaté que lorsque la concentration de l'indium et du bismuth augmente, l'énergie de transition diminue. Ceci était le but recherché.

En effectuant des calculs, on est parvenu à optimiser notre structure $GaInSbBi / GaInSb$ afin d'avoir une longueur d'onde d'émission $1.55\mu m$. Comme on peut le voir dans la figure 2.31 précisément la figure c où on constate que les 3 longueurs d'onde atteignent la valeur de $1.55 \mu m$.

Perspective : Ce serait de poursuivre notre étude et de calculer le gain optique et le courant de seuil afin de réaliser un composant laser fiable et émettant une longueur d'onde $1.55\mu\text{m}$. On peut aussi faire d'autres structures comme les multi puits quantiques et les boites quantiques.

A.1 Tableau périodique

Le tableau périodique des éléments est présenté avec les numéros de groupe (I à VIII) et de période (1 à 7). Les éléments sont classés par ordre croissant de masse atomique relative.

GROUPE																		18											
1		2												13		14		15		16		17		18					
IA		IIA												IIIA		IVA		VA		VIA		VIIA		VIIIA					
1	1.0079																											4.0026	
1	H																											He	
2	3 6.941	4 9.0122											5 10.811		6 12.011		7 14.007		8 15.999		9 18.998		10 20.180						
2	Li	Be											B		C		N		O		F		Ne						
3	11 22.990	12 24.305											13 26.982		14 28.086		15 30.974		16 32.065		17 35.453		18 39.948						
3	Na	Mg											Al		Si		P		S		Cl		Ar						
4	19 39.098	20 40.078	21 44.956	22 47.867	23 50.942	24 51.996	25 54.938	26 55.845	27 58.933	28 58.693	29 63.546	30 65.38	31 69.723	32 72.64	33 74.922	34 78.96	35 79.904	36 83.798											
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr											
5	37 85.468	38 87.62	39 88.906	40 91.224	41 92.906	42 95.96	43 (98)	44 101.07	45 102.91	46 106.42	47 107.87	48 112.41	49 114.82	50 118.71	51 121.76	52 127.60	53 126.90	54 131.29											
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe											
6	55 132.91	56 137.33	57-71	72 178.49	73 180.95	74 183.84	75 186.21	76 190.23	77 192.22	78 195.08	79 196.97	80 200.59	81 204.38	82 207.2	83 208.98	84 (209)	85 (210)	86 (222)											
6	Cs	Ba	La-Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn											
7	87 (223)	88 (226)	89-103	104 (267)	105 (268)	106 (271)	107 (272)	108 (277)	109 (276)	110 (281)	111 (280)	112 (285)	113 (...)	114 (287)	115 (...)	116 (291)	117 (...)	118 (...)											
7	Fr	Ra	Ac-Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo											

Copyright © 2012 Eri Gernandis

LANTHANOÏDES

57 138.91	58 140.12	59 140.91	60 144.24	61 (145)	62 150.36	63 151.96	64 157.25	65 158.93	66 162.50	67 164.93	68 167.26	69 168.93	70 173.05	71 174.97
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
LANTHANE	CÉSIUM	PRASÉODYME	NÉODYME	PRŒMETHIUM	SAMARIUM	EUROPIUM	GADOLINIUM	TERBIUM	DYSPROSIUM	HOÏMIUM	ERBIUM	THULIUM	YTERBIUM	LUTÉTIUM

ACTINOÏDES

89 (227)	90 232.04	91 231.04	92 238.03	93 (237)	94 (244)	95 (243)	96 (247)	97 (247)	98 (251)	99 (252)	100 (257)	101 (258)	102 (259)	103 (262)
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
ACTINIUM	THORIUM	PROACTINIUM	URANIUM	NEPTUNIUM	PLUTONIUM	AMÉRICIUM	CURSIUM	BÉRKÉLIUM	CALIFORNIUM	EINSTEINIUM	FÉRMOLIUM	MÉNDELÉVIUM	NOBÉLIUM	LAWRENCIUM

Figure A.1 : Tableau périodique des éléments.

A.2 Expression des paramètres

Pour les alliages ternaires ou quaternaires, les paramètres a , E_g , ac , av , δ_0 , b , C_{11} , C_{12} , me , γ_1 , γ_2 sont déterminés à partir de la loi de Vegard (2.1).

Pour déterminer les masses des trous lourds et des trous légers on utilise ces relations :

$$m_{hh} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$$

A.1

$$m_{lh} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$$

A.2

Bibliographie

- [1] F.Brouillard et A.Cornet : « L'effet LASER », Laboratoire de Physique et Chimie Biologique et Médicale, 2013.
- [2] A.Chovet et P.Masson : « physique des semi-conducteurs », ECOLE POLYTECHNIQUE UNIVERSITAIRE DE MARSEILLE, page 11, 2004/2005.
- [3] DEPARTEMENT E.E.A : « Physique et technologie des composants de puissance », université de Bordeaux 1,2003.
- [4] R.Castagné et all: « Circuits intégrés en arséniure de de Gallium. Physique, technologie et règles de conception », Masson et CINET ENST Paris, 1989.
- [5] A.GEDEON et A.KOZAK : « CHIMIE GENERALE », Université Pierre-et-Marie-Curie, CHAPITRE I – ATOMISTIQUE, (mise à jour : 28/5/2007).
- [6] A.Slami : « Etude et simulation d'une structure à base de GaNAsSb/GaAs pour le photovoltaïque », Université SAAD DAHLAB de BLIDA, 2013-2014.
- [7] A.GEORGES : « Physique de la matière condensée », Sciences mathématiques, physiques et naturelles France, p. 173-180, 2012-2013.
- [8] M.Benaïcha : « Etude des matériaux semi-conducteurs III-V Application à la conversion photovoltaïque », UNIVERSITE COLONEL HADJ LAKHDAR BATNA, 31 /10/2007.
- [9] A.VAPAILLE et R. CASTAGNE, « Dispositifs et circuits intégrés semi-conducteurs », Dunod, ISBN 2-04-019714-1, 1990.
- [10] Royer, L. : De l'épitaxie ; quelques remarques sur les problèmes qu'elle soulève. Bull. Soc. franç. Minér. Crist. 77 (1954) 1004-1028.

- [11] S.Djamel : « Modélisation et optimisation des lasers à puits quantiques à base de nitrures et de matériaux II-VI utilisant des hétérostructures de l'ordre de l'Angstrom », Université Hassiba Benbouali Chlef, 2009.
- [12] <http://jaaayyy.chez.com/html/HistoirePhysique/RapportLASER/theorie1.html>
- [13] A.Aissat, B.Alshehri, S.Nacer , J.P.Vilcot : « Theoretical investigation of GaAsN_{Bi}/GaAs materials for optoelectronic applications », Contents lists available at ScienceDirect, (2015)568–572, pp 02.
- [14] J. Kopaczek, M. K. Rajpalke, W. M. Linhart, T. S. Jones, M. J. Ashwin, R. Kudrawiec, et T. D. Veal: « Photoreflectance spectroscopy of GaInSbBi and AlGaSbBi quaternary alloys », AIP Publishing, Applied Physics Letters 105, 112102 (2014); doi: 10.1063/1.4895930.
- [15] Anthony R. West: « Solid State Chemistry and Its Applications », J.Wiley & Sons, 1991 (ISBN 0471908746, p. 367
- [16] S.NAIMI : « Etude et optimisation des paramètres physiques de la diode laser GaAsSbN/GaAs », mémoire de MAGISTERE, Université Djillali liabès de Sidi bel abas, 2011.
- [17] A. Aissat, S.Nacer, M.Seghilani, J.P.Vilcot : « Effect of on band alignment of compressively strained Ga(1-x)In(x)N(y)As(1-y-z)Sb(z)/GaAs quantum well structures », Physica E 43 (2010) 40–44, pp 01.
- [18] H.BOUAIED : « Modélisation et étude d'un puits quantique contraint à base de GaIn_{1-x}As/GaAs et calcul du courant de seuil », UNIVERSITE SAAD DAHLAB DE BLIDA, juillet 2011, p 26.
- [19] K. Köksal, B. Gönül et M. Oduncuoglu: « Critical layer thickness of GaIn(N)As(Sb) QWs on GaAs and InP substrates for (001) and (111) orientations », Eur. Phys. J. B69, 211–218 (2009).
- [20] Ghione, G: « Semiconductor Devices for High-Speed Optoelectronics », Politecnico Ditorino, Italy, Cambridge University Press, (2009).

[21] A.MOKHTAROVA : « Puits quantique de composés Nitrures InGaN/GaN pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, physique/Nanophysique, 2016, Université de Grenoble. .